_		4.0
1		18

1 H	2											13	14	15	16	17	2 He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 N a	12 Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba	*57-71 lantánidos	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra	‡89-103 actínidos	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 D s	111 Rg	112 [#] Uub	113 # Uut	114 # Uuq	115 [#] Uup	116 # Uuh	117 Uus	118 Uuo
		* 57 L a	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu	
		‡ 89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr	

*NT. Los elementos 112–118 han sido aislados y se nombran de forma sistemática según las normas de la IUPAC.

Unión Internacional de Química Pura y Aplicada

Nomenclatura de Química Inorgánica Recomendaciones de 2005

Producida por la División de Nomenclatura Química y Representación Estructural en colaboración con la División de Química Inorgánica

Preparada para la publicación por

Neil G. Connelly

Universidad de Bristol, Gran Bretaña

Richard M. Hartshorn

Universidad de Canterbury, Nueva Zelanda

Ture Damhus

Novozymes A/S, Dinamarca

Alan T. Hutton

Universidad de Ciudad del Cabo, Sudáfrica

Versión española elaborada por

Miguel A. Ciriano

CSIC-Universidad de Zaragoza, España

Pascual Román Polo

Universidad del País Vasco, España

Prólogo

La nomenclatura química debe evolucionar para reflejar las necesidades de la comunidad que la usa. En particular, la nomenclatura tiene que crearse para describir nuevos compuestos o clases de compuestos, modificarse para resolver ambigüedades que pueden surgir, o ser clarificada donde haya confusión en la manera en que tiene que usarse. También existe la necesidad de elaborar una nomenclatura tan sistemática y sin complicaciones como sea posible para ayudar a los usuarios menos familiarizados con ella (por ejemplo, porque están en el proceso de estudio de la química o porque no son químicos pero necesitan tratar con productos químicos en el trabajo o en casa). Consecuentemente, se inició en 1998 una revisión de *Nomenclatura de Química Inorgánica*. *Recomendaciones IUPAC de 1990* (el 'Libro Rojo I') bajo la dirección de la Comisión de Nomenclatura de Química Inorgánica (CNIC, en sus siglas inglesas) de la IUPAC. Posteriormente, al abolirse la CNIC en 2001 como parte de una reestructuración general de la IUPAC, un "Grupo de Proyecto" continuó trabajando bajo los auspicios de la División de Nomenclatura Química y Representación Estructural (División VIII).

La necesidad de asegurar que los sistemas de nomenclatura inorgánica y orgánica son coherentes, en la medida de lo posible, ha dado lugar a una extensa cooperación entre los editores del *Libro Rojo* revisado y los de *Nomenclatura de Química Orgánica, Recomendaciones IUPAC* (el *Libro Azul* revisado, en fase de preparación). Hasta ahora, no se ha aplicado todavía a la nomenclatura inorgánica el concepto de nombres preferidos por la IUPAC (PINs, en sus iniciales inglesas), un importante elemento de la actual revisión del *Libro Azul*. Sin embargo, en este libro se usan, donde es pertinente, nombres preferidos (PINs) de compuestos orgánicos, es decir, que contienen carbono. El futuro proyecto sobre los PINs inorgánicos, ya programado, tendrá que enfrentarse al problema de elegir entre los sistemas de nomenclatura igualmente válidos actualmente en uso.

El presente libro no sólo reemplaza al *Libro Rojo I* sino también, donde sea procedente, a *Nomenclatura de Química Inorgánica II. Recomendaciones IUPAC de 2000* (el *Libro Rojo II*). Uno de los principales cambios respecto del *Libro Rojo I* es la diferente organización del material, que se ha adoptado para mejorar la claridad. Así, los capítulos IR-5 (Nomenclatura de composición y visión panorámica de los nombres de iones y radicales), IR-6 (Nombres de los hidruros progenitores y nomenclatura de sustitución), e IR-7 (Nomenclatura de adición) tratan de las características generales de los tres sistemas principales de nomenclatura aplicados a los compuestos inorgánicos. (Obsérvese que se usa la notación 'IR-' para distinguir los capítulos y secciones en el presente libro de los del *Libro Rojo I* que tienen el prefijo 'I-'). Los tres capítulos siguientes tratan de su aplicación, particularmente de la nomenclatura de adición, a tres grandes clases de compuestos:

ácidos inorgánicos y derivados (Capítulo IR-8), compuestos de coordinación (Capítulo IR-9) y compuestos organometálicos (Capítulo IR-10). En conjunto, se ha reforzado aquí el énfasis en la nomenclatura de adición (generalizada de la nomenclatura clásica de los compuestos de coordinación) que ya era evidente en el *Libro Rojo I*. También se han incluido ejemplos de compuestos orgánicos, en la frontera entre la química inorgánica y orgánica, que pueden nombrarse con facilidad usando la nomenclatura de adición (aunque sus PINs serán diferentes).

El Capítulo IR-10 sobre compuestos organometálicos es una importante adición en este libro, lo que supone su separación de los compuestos de coordinación (Capítulo IR-9) para reflejar el enorme crecimiento en importancia de la química organometálica y los muy diferentes problemas asociados con la presencia de ligandos π-enlazados. El Capítulo IR-9 ha sufrido una considerable revisión (compárese con el antiguo Capítulo I-10 del *Libro Rojo I*). Este capítulo revisado incluye una clarificación del uso de la nomenclatura η y κ en los compuestos de coordinación y organometálicos (Sección IR-9.2.4.3); nuevas reglas para ordenar los átomos centrales en los nombres de los compuestos polinucleares (Sección IR-9.2.5.6); el agrupamiento de las secciones sobre configuración (Sección IR-9.3) y su separación de las de constitución (Sección IR-9.2), y la adición de símbolos poliédricos para las moléculas en forma de T (Sección IR-9.3.3.7) y en forma de balancín (Sección IR-9.3.3.8), junto con las indicaciones para elegir entre éstas formas y las de las estructuras estrechamente relacionadas (Sección IR-9.3.2.2).

El capítulo sobre los Oxoácidos y Aniones Derivados (Capítulo I-9 del *Libro Rojo I*) también ha sido modificado en gran medida; con el nuevo título Ácidos Inorgánicos y Derivados (Capítulo IR-8), incluye el concepto de 'Nomenclatura de hidrógeno' ligeramente revisado en la Sección IR-8.4 (y algunos nombres tradicionales 'oso' e 'ico', que han sido reincorporados por coherencia y porque se necesitan para la nomenclatura orgánica, es decir, en el nuevo *Libro Azul*).

El lector enfrentado al problema de cómo nombrar un compuesto o especie determinados puede hallar ayuda de varias maneras. En la Sección IR-.1.5.3.5 se encuentra un diagrama de flujo que, en la mayor parte de los casos, guiará al lector a una sección o capítulo donde puede encontrar las reglas para generar, al menos, un posible nombre; un segundo diagrama de flujo se ofrece en la Sección IR-9.2.1 para ayudar en la aplicación de la nomenclatura de adición y, específicamente, en la de los compuestos de coordinación y organometálicos. También se facilita en este libro un índice temático más detallado, así como una extensa guía, en la Tabla IX, de posibles nombres alternativos para una amplia gama de compuestos inorgánicos sencillos, iones y radicales.

Para la mayoría de los compuestos, las fórmulas son otro tipo importante de representación de su composición o su estructura y para algunos compuestos una fórmula es quizás lo más fácil de construir. En el Capítulo IR-4 (Fórmulas) se han realizado varios cambios con el fin de que la presentación de una fórmula y su nombre correspondiente sean más coherentes, por ejemplo, el

orden de citación de los ligandos (que ahora no depende de la carga del ligando) (Sección IR-4.4.3.2) y el orden y uso de los signos de inclusión (simplificados y más consistentes con el uso propuesto para la nomenclatura de compuestos orgánicos) (Sección IR-4.2.3). Además, el uso de las abreviaturas de los ligandos puede hacer que las fórmulas sean menos incómodas. Así, las recomendaciones para la construcción y uso de las abreviaturas se proporcionan en la Sección IR-4.4.4, junto con una lista exhaustiva de las abreviaturas habituales, mostradas en la Tabla VII (y con las fórmulas estructurales de los ligandos, recogidas en la Tabla VIII).

Dos capítulos del *Libro Rojo I* han sido acortados o incluidos en otros, puesto que ambas áreas necesitan todavía una profunda revisión. En primer lugar, el capítulo sobre sólidos (IR-11) describe ahora solamente temas básicos; los desarrollos más recientes en este área tenderán a cubrirse por las publicaciones de la Unión Internacional de Cristalografía (IUCr, en sus siglas inglesas). Cabe esperar que una futura cooperación entre la IUPAC y la IUCr conducirá a la nomenclatura adicional requerida para el campo de la química del estado sólido, que se encuentra en rápida y creciente expansión. En segundo lugar, la química del boro, particularmente la de los compuestos polinucleares, también ha experimentado un considerable desarrollo. De nuevo, se cubre aquí únicamente lo más básico de la nomenclatura de los compuestos que contienen boro (compárese con el capítulo monográfico, más completo pero anticuado, sobre nomenclatura del boro, I-11 en el *Libro Rojo I*) en el Capítulo IR-6 (Nombres de los hidruros progenitores y nomenclatura de sustitución), mientras que los aspectos más avanzados se reservan para su elaboración en un proyecto futuro.

Otros cambios efectuados incluyen una sección sobre los nuevos elementos y el procedimiento por el que se nombran actualmente (Sección IR-3.1) y una revisión simplificada del método sistemático para nombrar cadenas y ciclos (adaptado del Capítulo II-5 del *Libro Rojo II*). Además, no se incluyen la sección de polímeros de monocadena, ahora puesta al día como Capítulo II-7 en el *Libro Rojo II*, y las diferentes versiones de la tabla periódica pasadas de moda. La versión actual recomendada por la IUPAC se presenta en una de las primeras páginas del libro.

Algunas nuevas recomendaciones representan rupturas con la tradición con el fin de aumentar la claridad y la consistencia. Por ejemplo, un cambio hacia un tratamiento más sistemático consiste en el uso de la terminación '-*uro*' (-*ide*) para todos los ligandos aniónicos cuyos nombres acaban en '-*uro*' (-*ido*) en la nomenclatura de adición (por ejemplo, cloruro y cianuro en lugar de cloro y ciano, e hidruro en todos los casos, incluyendo la nomenclatura del boro). [#]

_

[#] Nota de los traductores (NT). La traducción del cambio de la terminación '-ide' por '-ido' en inglés no tiene correspondencia en castellano y es consecuente con la terminación en 'o' de los ligandos aniónicos propuesta en el Libro Rojo I.

Agradecimientos

Es importante recordar que el actual volumen procede de versiones anteriores del *Libro Rojo* y, por tanto, es justo agradecer en primer lugar los esfuerzos de los editores y colaboradores anteriores. No obstante, también quisiéramos dar las gracias a muchas personas sin cuya ayuda esta revisión no hubiera sido posible. A los miembros del CNIC que se implicaron en las fases iniciales de la revisión (incluyendo a Stanley Kirschner, que comenzó la tarea de recopilar las abreviaturas de los ligandos, y que se ha transformado en las Tablas VII y VIII), y a los miembros de la División VIII del Subcomité Consultivo de la IUPAC (en especial, a Jonathan Brecher, Piroska Fodor-Csányi, Risto Laitinen, Jeff Leigh y Alan McNaught) y a los editores del *Libro Azul* revisado (Warren Powell y Henri Favre) cuyos comentarios han sido extraordinariamente valiosos. Sin embargo, la mayor parte del trabajo ha sido realizado por un 'Grupo de Proyecto' que incluye a los dos editores principales, a Richard Hartshorn y a Alan Hutton.

NEIL G. CONNELLY Y TURE DAMHUS (Editores Principales)

INDICE

IR-1	OBJETIVOS GENERALES, FUNCIONES Y MÉTODOS
	DE LA NOMENCLATURA QUÍMICA 1
IR-1.1	Introducción 1
IR-1.1	Historia de la nomenclatura química 2
IR-1.3	Objetivos de la nomenclatura química 3
IR-1.4	Funciones de la nomenclatura química 4
IR-1.4 IR-1.5	Métodos de la nomenclatura inorgánica 4
IR-1.5	Cambios a las recomendaciones anteriores de la IUPAC 8
IR-1.7	Recomendaciones de nomenclatura en otras áreas de la química 13
IR-1.8	Referencias 14
IR-2	GRAMÁTICA 16
IR-2.1	Introducción 17
IR-2.2	Signos de inclusión 18
IR-2.3	Guiones, signos más y menos, guiones extralargos e indicadores de enlace 25
IR-2.4	Barras 27
IR-2.5	Puntos, dos puntos, comas, punto y coma 28
IR-2.6	Espacios 30
IR-2.7	Elisiones 31
IR-2.8	Números 31
IR-2.9	Letras cursivas 34
IR-2.10	Alfabeto griego 35
IR-2.11	Asteriscos 36
IR-2.12	Primas 37
IR-2.13	Prefijos multiplicadores 37
IR-2.14	Localizadores 38
IR-2.15	Principios de ordenación 40
IR-2.16	Notas finales 44
IR-2.17	Referencias 45
IR-3	LOS ELEMENTOS 46
IR-3.1	Nombres y símbolos de los átomos 46
IR-3.2	Indicación de la masa, carga y número atómico usando
	índices (subíndices y superíndices) 47
IR-3.3	Isótopos 48

IR-3.4	Elementos (o sustancias elementales) 48
IR-3.5	Elementos en la tabla periódica 51
IR-3.6	Referencias 52
IR-4	FORMULAS 53
IR-4.1	Introducción 54
IR-4.2	Definiciones de los tipos de fórmulas 54
IR-4.3	Indicación de la carga ionica 57
IR-4.4	Secuencia de citación de los símbolos en las fórmulas 58
IR-4.5	Compuestos modificados isotópicamente 64
IR-4.6	Modificadores opcionales de las fórmulas 66
IR-4.7	Referencias 68
IR-5	NOMENCLATURA DE COMPOSICIÓN Y VISIÓN PANORÁMICA DE LOS NOMBRES DE IONES Y RADICALES 69
IR-5.1	Introducción 69
IR-5.2	Nombres estequiométricos de los elementos y de compuestos binarios 70
IR-5.3	Nombres de los iones y radicales 71
IR-5.4	Nombres estequiométricos generalizados 76
IR-5.5	Nombres de los compuestos de adición 81
IR-5.6	Resumen 82
IR-5.7	Referencias 82
IR-6	NOMBRES DE LOS HIDRUROS PROGENITORES Y NOMENCLATURA DE SUSTITUCIÓN 83
IR-6.1	Introducción 84
IR-6.2	Nombres de los hidruros progenitores 84
IR-6.3	Nomenclatura de sustitución de los derivados de los hidruros progenitores 101
IR-6.4	Nombres de los iones y radicales derivados de los hidruros progenitores 104
IR-6.5	Referencias 110
IR-7	NOMENCLATURA DE ADICIÓN 111
IR-7.1	Introducción 111
IR-7.2	Compuestos mononucleares 113
IR-7.3	Compuestos polinucleares 114
IR-7.4	Cadenas y ciclos inorgánicos 118
IR-7.5	Referencias 123

IR-8	ACIDOS INORGANICOS Y SUS DERIVADOS 124	
IR-8.1	Introducción y resumen 124	
IR-8.2	Principios generales de la nomenclatura sistemática de los ácidos	126
IR-8.3	Nomenclatura de adición 133	
IR-8.4	Nomenclatura de hidrógeno 134	
IR-8.5	Nombres de hidrógeno abreviados de algunos aniones 137	
IR-8.6	Nombres de reemplazo funcional de los derivados de oxoácidos	137
IR-8.7	Referencias 141	
IR-9	COMPUESTOS DE COORDINACIÓN 142	
IR-9.1	Introducción 144	
IR-9.2	Descripción de la constitución de los compuestos de coordinación	149
IR-9.3	Descripción de la configuración de los compuestos de coordinación	174
IR-9.4	Notas finales 196	
IR-9.5	Referencias 196	
IR-10	COMPUESTOS ORGANOMETÁLICOS 198	
IR-10.1	Introducción 199	
IR-10.2	Nomenclatura de los compuestos organometálicos	
	de los elementos de transición 199	
IR-10.3	Nomenclatura de los compuestos organometálicos	
	de los elementos de los grupos representativos 227	
IR-10.4	Ordenación de los átomos centrales en los	
	compuestos organometálicos polinucleares 231	
IR-10.5	Referencias 233	
IR-11	SÓLIDOS 234	
IR-11.1	Introducción 235	
IR-11.2	Nombres de las fases sólidas 235	
IR-11.2 IR-11.3	Composición química 236	
IR-11.4	Notación de los defectos puntuales (Kröger-Vink) 237	
IR-11.4 IR-11.5	Nomenclatura de las fases 240	
IR-11.5 IR-11.6	Fases no-estequiométricas 241	
IR-11.0 IR-11.7	Polimorfismo 244	
IR-11.7 IR-11.8	Notas finales 245	
IR-11.6		
111 - 1 1 7	DVD-40-40-10-5 /	

TABLAS

Tabla I	Nombres, símbolos y números atómicos de los elementos 246	
Tabla II	Nombres temporales de los elementos de número atómcio mayor de 111	248
Tabla III	Sufijos y terminaciones	
Tabla IV	Prefijos multiplicadores	
Tabla V	Afijos geométricos y estructurales	
Table VI	La secuencia de los elementos	
T 11 TITE		

Tabla VII Abreviaturas de ligandos

Tabla VIII Fórmulas estructurales de ligandos seleccionados

Tabla IX Nombres de moléculas homoatómicas, binarias y algunas otras sencillas, iones, compuestos, radicales y grupos sustituyentes

Tabla X Nombres de los aniones, términos en 'a' usados en la nomenclatura de sustitución y términos en 'i' usados en la nomenclatura de los ciclos y cadenas

ÍNDICE DE MATERIAS

Objetivos generales, funciones y métodos de la IR-1 nomenclatura química

CONTENIDO

IK-1.1	minoducción	
IR_1 2	Historia de la nomenclatura di	,

- IR-1.2 Historia de la nomenclatura química
 - IR-1.2.1 Cooperación internacional en la nomenclatura inorgánica
- IR-1.3 Objetivos de la nomenclatura química
- IR-1.4 Funciones de la nomenclatura química
- IR-1.5 Métodos de la nomenclatura inorgánica
 - IR-1.5.1 Formulación de las reglas
 - IR-1.5.2 Construcción de los nombres
 - IR-1.5.3 Sistemas de nomenclatura
 - IR-1.5.3.1 Generalidades
 - IR-1.5.3.2 Nomenclatura de composición
 - IR-1.5.3.3 Nomenclatura de sustitución
 - IR-1.5.3.4 Nomenclatura de adición
 - IR-1.5.3.5 Procedimientos generales para dar nombres

IR-1.6 Cambios a las recomendaciones anteriores de la IUPAC

- IR-1.6.1 Nombres de los cationes
- Nombres de los aniones IR-1.6.2
- IR-1.6.3 La secuencia de los elementos de la Tabla VI
- Nombres de los ligandos aniónicos en entidades de coordinación (formales) IR-1.6.4
- Fórmulas de las entidades de coordinación (formales) IR-1.6.5
- IR-1.6.6 Nombres de adición de las entidades polinucleares
- Nombres de los ácidos inorgánicos IR-1.6.7
- Compuestos de adición IR-1.6.8
- IR-1.6.9 Miscelánea
- IR-1.7 Recomendaciones de nomenclatura en otras áreas de la química
- IR-1.8 Referencias

IR-1.1 INTRODUCCIÓN

Este capítulo proporciona una breve visión histórica de la nomenclatura química (Sección IR-1.2), a la que sigue un resumen de sus objetivos, funciones y métodos (Secciones IR-1.3–IR-1.5). También se describen sucintamente en este capítulo (Sección IR-1.5.3.5) los diferentes sistemas de nomenclatura que se pueden aplicar a compuestos inorgánicos, a modo de introducción de posteriores capítulos más detallados. Puesto que cada sistema puede proporcionar un nombre válido para un compuesto determinado, se presenta un diagrama de flujo en la Sección IR-1.5.3 que debe ayudar a identificar cual de ellos es el más adecuado para el tipo de compuesto en cuestión. En la Sección IR-1.6 se resumen los cambios más importantes respecto a recomendaciones anteriores y, finalmente, se hace una referencia a las recomendaciones de nomenclatura en otras áreas de la química en la Sección IR-1.7, destacando que la química inorgánica es una parte de un conjunto total integrado.

IR-1.2 HISTORIA DE LA NOMENCLATURA QUÍMICA

Las actividades de la alquimia y de las artes aplicadas que se practicaban antes del comienzo de lo que hoy conocemos como la ciencia química, produjeron un rico vocabulario para describir las sustancias químicas, aunque los nombres de las especies individuales daban escasa información sobre su composición. No obstante, Guyton de Morveau desarrolló un 'sistema' de nomenclatura química en 1782,¹ coincidiendo casi en el tiempo con la fundación de la auténtica ciencia química. La declaración de Guyton afirmando que era necesario un 'método constante de denominación que ayude a la inteligencia y alivie la memoria' define claramente los fines básicos de la nomenclatura química. Su sistema fue ampliado por medio de una publicación conjunta con Lavoisier, Berthollet y de Fourcroy,² y fue popularizado por Lavoisier.³ Posteriormente, Berzelius abanderó las ideas de Lavoisier, adaptando la nomenclatura a las lenguas germánicas,⁴ ampliando el sistema y añadiendo muchos términos nuevos. Este sistema, formulado antes del enunciado de la teoría atómica de Dalton, estaba basado en que los elementos forman compuestos con el oxígeno y, a su vez, los óxidos reaccionan entre sí para formar sales; los nombres de dos palabras se parecían, de algún modo, al sistema binario introducido por Linneo (Carl von Linné) para las especies animales y vegetales.

Cuando la teoría atómica se desarrolló hasta el punto en que era posible escribir las fórmulas específicas de los diferentes óxidos y de otros compuestos binarios, se generalizaron los nombres que reflejaban la composición con mayor o menor precisión; sin embargo, nunca se adoptaron nombres que reflejaran la composición de las oxosales. Aunque el número de los compuestos inorgánicos crecía rápidamente, el modelo esencial de nomenclatura se alteró muy poco hasta aproximadamente finales del siglo XIX. Conforme surgía una necesidad, se proponía un nombre y, consecuentemente, la nomenclatura creció más por acumulación que por sistematización.

Cuando Arrhenius concentró la atención en los iones y en las moléculas, se hizo necesario dar nombres a las partículas cargadas, además de nombrar las especies neutras. No se consideró necesario desarrollar una nueva nomenclatura para las sales; los cationes se designaron con los nombres de sus metales correspondientes y los aniones con un nombre modificado de la parte nometálica.

Junto con la teoría de la coordinación, Werner⁵ propuso un sistema de nomenclatura para los compuestos de coordinación, que no sólo reproducía su composición sino que también indicaba la estructura de muchos de ellos. El sistema de Werner era completamente aditivo: se citaban los nombres de los ligandos, a los que seguía el nombre del átomo central modificado por el sufijo '-ato' si el complejo era un anión. Werner usó también descriptores estructurales y localizadores. El

sistema de nomenclatura de adición era capaz de expandirse y adaptarse a los nuevos compuestos e incluso a otras áreas de la química.

IR-1.2.1 Cooperación internacional en la nomenclatura inorgánica

Mientras que la conferencia de Ginebra⁶ en 1892 sentó las bases de un sistema de nomenclatura orgánica aceptado internacionalmente, en esa época no existía nada comparable para la nomenclatura inorgánica. Efectivamente, se habían diseñado muchos sistemas *ad hoc* con propósitos particulares, en lugar de ser generales, y frecuentemente aparecían dos o más métodos para nombrar un compuesto dado perteneciente a una clase determinada. Cada nombre podía tener validez en una situación específica o ser preferido por algunos autores, pero ello daba lugar a la posibilidad de confusión.

La necesidad de una práctica uniforme entre los químicos de lengua inglesa se puso de manifiesto desde 1886 y dio lugar a acuerdos de uso mutuo entre las sociedades químicas americana y británica. En 1913, el Consejo de la Asociación Internacional de Sociedades Químicas creó una comisión para la nomenclatura inorgánica y orgánica, pero la Primera Guerra Mundial interrumpió bruscamente sus actividades. El trabajo se reanudó en 1921, cuando la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC en sus siglas inglesas), durante su segunda conferencia, nombró comisiones de nomenclatura de química inorgánica, orgánica y biológica.

El primer informe completo de la comisión inorgánica de 1940,⁷ tuvo un efecto significativo en la sistematización de la nomenclatura inorgánica e hizo que muchos químicos tomasen conciencia de la necesidad de diseñar una nomenclatura completamente sistemática. Entre las características más relevantes de este informe inicial destacan: la adopción del sistema de Stock para indicar los estados de oxidación, el establecimiento del orden de citación de los constituyentes de compuestos binarios en las fórmulas y nombres, la desaprobación del uso de bicarbonato, etc. en los nombres de las sales ácidas y el desarrollo de prácticas uniformes para nombrar los compuestos de adición.

Estas recomendaciones de la IUPAC se revisaron y aparecieron en forma de un pequeño libro en 1959,⁸ al que siguió una segunda revisión en 1971⁹ y un suplemento titulado *Cómo nombrar una sustancia inorgánica* en 1977.¹⁰ En 1990¹¹ se revisaron completamente las recomendaciones de la IUPAC para incluir los numerosos y variados cambios producidos en los veinte años anteriores.*

Desde 1990 se han abordado áreas más especializadas que se refieren a polianiones, ¹² complejos metálicos de los tetrapirroles (basado en la referencia 13), compuestos inorgánicos cíclicos y en cadena, ¹⁴ y compuestos de intercalación del grafito. ¹⁵ Estos temas, junto con las versiones revisadas de artículos sobre compuestos inorgánicos modificados isotópicamente, ¹⁶ hidruros del nitrógeno y sus cationes, aniones y ligandos derivados de ellos, ¹⁷ y polímeros inorgánicos y de coordinación de monocadena y quasi monocadena regulares, ¹⁸ constituyen los siete capítulos del libro *Nomenclatura de Química Inorgánica II, Recomendaciones IUPAC de 2000.* ¹⁹ El artículo titulado *Nomenclatura de compuestos organometálicos de los elementos de transición* ²⁰ constituye la base del Capítulo IR-10 de este libro.

IR-1.3 OBJETIVOS DE LA NOMENCLATURA QUÍMICA

El fin principal de la nomenclatura química es simplemente proporcionar una metodología para

-

[#] La IUPAC se fundó en 1919 por químicos de la industria y del mundo académico.

^{*} NT. *Nomenclatura de Química Inorgánica, Recomendaciones de 1990*, G. J. Leigh (Ed.). Versión española elaborada por Luis F. Bertello y Carlos Pico Marín, Editorial Centro de Estudios Ramón Areces S.A., Madrid 1990.

asignar descriptores (nombres y fórmulas) a las sustancias químicas, de manera que puedan identificarse sin ambigüedad, y de este modo facilitar la comunicación. Una finalidad subsidiaria es lograr su estandarización, lo cual no necesita ser tomado en sentido estricto como para exigir un nombre único para cada sustancia. Sin embargo, el número de nombres 'aceptables' debería minimizarse.

Las necesidades comunes y el uso diario también deben tenerse en cuenta al desarrollar un sistema de nomenclatura. En algunos casos, el único requerimiento puede ser identificar una sustancia, que era, fundamentalmente, la necesidad antes de finales del siglo XVIII. Así, pequeños grupos de especialistas utilizan todavía nombres locales y abreviaturas. Estos nombres locales son suficientes mientras los especialistas entiendan los dispositivos usados para la identificación. Sin embargo, esto no es nomenclatura tal y como se ha definido anteriormente, ya que los nombres locales no comunican ni información de la composición ni de la estructura a una audiencia más amplia. Para que sea completamente útil, un sistema de nomenclatura debe ser identificable, preciso y general; por tanto, debe rechazarse el uso de nombres locales y abreviaturas en el lenguaje científico formal.

IR-1.4 FUNCIONES DE LA NOMENCLATURA QUÍMICA

El primer estadio de la nomenclatura, que va más allá de la asignación de nombres completamente triviales, proporciona alguna información sistemática de una sustancia pero no permite inferir su composición. La mayoría de los nombres comunes de los oxoácidos (v.g., ácido sulfúrico, ácido perclórico) y de sus sales son de este tipo. Dichos nombres, que se pueden calificar como semisistemáticos, son aceptables en la medida en que existen para compuestos utilizados frecuentemente y comprendidos por los químicos. Sin embargo, debe admitirse que pueden dificultar la comprensión de su composición a quienes tengan una formación química limitada.

Cuando un nombre por sí mismo permite deducir la fórmula estequiométrica de un compuesto de acuerdo con reglas generales, se convierte en verdaderamente sistemático. Sólo los nombres de este segundo nivel de nomenclatura son adecuados para la recuperación de la información de las bases de datos.

El deseo de incorporar la información relativa a estructuras tridimensionales de las sustancias ha crecido rápidamente y, en consecuencia, la sistematización de la nomenclatura ha tenido que extenderse a un tercer nivel de refinamiento. Pocos químicos necesitan llegar a tal nivel de complejidad cada vez que se refieren a un compuesto, pero pueden querer hacerlo cuando lo precisen.

Un cuarto nivel de nomenclatura puede requerirse para aquellos que deban recopilar y utilizar índices extensos en las fuentes bibliográficas. El esfuerzo, tanto para el recopilador como para el que realiza una consulta, de definir entradas múltiples para un compuesto determinado es prohibitivo; por tanto, es necesario desarrollar unas reglas sistemáticas y jerárquicas que den un nombre único para una sustancia dada.

IR-1.5 MÉTODOS DE LA NOMENCLATURA INORGÁNICA

IR-1.5.1 Formulación de las reglas

La revisión de la nomenclatura es un proceso continuo, ya que los nuevos descubrimientos exigen la actualización de los sistemas de nomenclatura. La IUPAC, por medio de la División de Nomenclatura Química y Representación Estructural (creada en 2001), estudia todos los aspectos de la nomenclatura de sustancias inorgánicas y otras, recomendando los usos más aconsejables para

resolver problemas específicos, por ejemplo, para escribir fórmulas y generar nombres. Las nuevas reglas de nomenclatura deben formularse con precisión para suministrar una base sistemática de cómo asignar los nombres y las fórmulas en el ámbito de las áreas a las que se aplican. Sin embargo, y mientras sea posible, deben ser coherentes con la nomenclatura recomendada que ya existe en química inorgánica y en otras áreas de la química y tener en cuenta la química que está emergiendo.

IR-1.5.2 Construcción de los nombres

La denominación sistemática de una sustancia inorgánica implica la construcción de un nombre a partir de entidades que se manejan según procedimientos definidos que proporcionan información sobre la composición y la estructura. Los nombres de los elementos (o las raíces que se derivan de ellos o de sus equivalentes en latín) (Tablas I y II*, véase también el Capítulo IR-3) se combinan con afijos para construir nombres sistemáticos mediante procedimientos que se conocen como sistemas de nomenclatura.

Existen varios sistemas aceptados para la construcción de los nombres, tal como se comenta en la Sección IR-1.5.3. Quizás, el más sencillo es el que se usa para nombrar las sustancias binarias. Dicho conjunto de reglas lleva a un nombre como dicloruro de hierro para la sustancia FeCl₂; este nombre implica la yuxtaposición de los nombres de los elementos (cloro y hierro), su ordenación de una manera específica (electronegativo delante de electropositivo), a modificación del nombre de un elemento para indicar la carga (la terminación '-uro' designa un anión elemental y, en general, un elemento considerado formalmente como un anión) y el uso del prefijo multiplicador 'di-' para indicar la composición.

Los nombres se construyen, cualquiera que sea el modelo de nomenclatura, a partir de entidades de las siguientes clases:

Raíces de nombres de elementos

Prefijos multiplicadores

Prefijos que indican átomos o grupos, ya sean sustituyentes o ligandos

Sufijos que indican la carga

Nombres y desinencias que denotan compuestos progenitores

Sufijos que indican grupos sustituyentes característicos

Infijos

Localizadores

Descriptores (estructurales, geométricos, espaciales, etc.)

Signos de puntuación

IR-1.5.3 Sistemas de nomenclatura

IR-1.5.3.1 Generalidades

En el desarrollo de la nomenclatura, han aparecido diversos sistemas para la construcción de los nombres químicos; cada uno de ellos tiene su propia lógica inherente y su conjunto de reglas (gramática). Algunos sistemas son de extensa aplicabilidad; sin embargo, la práctica ha conducido

^{*} Las tablas numeradas con números romanos se encuentran juntas al final de este libro.

[#] NT. Sin embargo, en la fórmula del compuesto se escriben en el orden inverso. Ello es debido a que en español no existe el genitivo sajón y se produce la inversión a la hora de escribir los elementos químicos.

al uso de otros sistemas especializados en determinadas áreas de la química. La existencia de varios sistemas de nomenclatura diferentes conduce a nombres alternativos, coherentes lógicamente, para una sustancia. Esta flexibilidad es útil en algunos contextos, pero la excesiva proliferación de alternativas puede dificultar la comunicación e incluso impedir procedimientos comerciales y legislativos. La confusión también puede darse cuando se use erróneamente la gramática de un sistema de nomenclatura en otro, lo que produce nombres que no representan a ninguno de ellos.

Los tres sistemas de importancia fundamental en química inorgánica: las nomenclaturas de composición, sustitución y adición se describen con mayor detalle en los Capítulos IR-5, IR-6 e IR-7, respectivamente. La nomenclatura de adición es posiblemente la de mayor aplicación general en química inorgánica, aunque la nomenclatura de sustitución puede aplicarse en áreas en que es más adecuada. Ambos sistemas requieren el conocimiento de la constitución (conectividad) del compuesto o especies que se van a nombrar. Si se conoce o se quiere comunicar solamente la estequiometría o composición de un compuesto, entonces se usa la nomenclatura de composición.

IR-1.5.3.2 Nomenclatura de composición

Este término se usa en las actuales recomendaciones para denotar las construcciones de nombres que están basadas solamente en la composición de las sustancias o especies que se van a nombrar, en contraposición a los sistemas que implican información estructural. Una construcción de este tipo es la de un *nombre estequiométrico* generalizado. Los nombres de los componentes, que pueden ser elementos o entidades compuestas (tales como iones poliatómicos), se indican con los prefijos multiplicadores que dan la estequiometría completa del compuesto. Si existieran dos o más componentes, éstos se dividirían formalmente en dos clases: los electropositivos y los electronegativos. A este respecto, los nombres son similares a los de las sales tradicionales, aunque ello no tiene implicaciones sobre la naturaleza química de las especies que se nombran.

Se requieren reglas gramaticales para especificar el orden de los componentes, el uso de prefijos multiplicadores y las terminaciones adecuadas para los nombres de los componentes electronegativos.

Ejemplos:

- 1. trioxígeno, O₃
- 2. cloruro de sodio, NaCl
- 3. tricloruro de fósforo, PCl₃
- 4. pentabismuturo de trisodio, Na₃Bi₅
- 5. cloruro hidróxido de magnesio, MgCl(OH)
- 6. cianuro de sodio, NaCN
- 7. cloruro de amonio, NH₄Cl
- 8. acetato de sodio, NaO₂CMe

IR-1.5.3.3 Nomenclatura de sustitución

La nomenclatura de sustitución se utiliza ampliamente para los compuestos orgánicos y se basa en el concepto de un hidruro progenitor que se modifica al sustituir los átomos de hidrógeno por otros átomos y/o grupos.²¹ (Se usa en particular para dar el nombre a los ligandos orgánicos en la nomenclatura de compuestos de coordinación y organometálicos, aunque éste sea un sistema

totalmente de adición).

También se usa para nombrar los compuestos que se derivan formalmente de los hidruros de algunos elementos de los grupos 13–17 de la tabla periódica. Estos elementos, como el carbono, forman cadenas y ciclos (o anillos), que pueden tener muchos derivados. Así, el sistema evita la necesidad de especificar la localización de los átomos de hidrógeno del hidruro progenitor. Las reglas son necesarias para nombrar los compuestos progenitores y los sustituyentes, para establecer el orden de citación de los nombres de los sustituyentes y para especificar las posiciones de unión de estos últimos.

Ejemplos:

- 1. 1,1-difluorotrisilano, SiH₃SiH₂SiHF₂
- 2. triclorofosfano, PCl₃

Las operaciones en las que algunos átomos que no sean de hidrógeno en los progenitores se reemplazan por grupos o átomos diferentes, por ejemplo, los reemplazamientos en el esqueleto que llevan a nombres en 'a' en química orgánica (véanse las Secciones P-13.2. y P-51.3 de la referencia 21), se consideran normalmente que son parte de la nomenclatura de sustitución y se usan también en ciertas partes de la química inorgánica.

Ejemplos:

- 3. 1,5-dicarba-*closo*-pentaborano(5), B₃C₂H₅ (CH reemplaza a BH)
- 4. ácido \$ estiboroditióico, H₃SbO₂S₂

Las operaciones de sustracción se consideran también que son parte de la maquinaria de la nomenclatura de sustitución

Ejemplo:

5. 4,5-dicarba-9-debor-closo-nonaborato(2–), $[B_6C_2H_8]^{2-}$ (pérdida de BH)

IR-1.5.3.4 Nomenclatura de adición

La nomenclatura de adición considera que un compuesto o especie es una combinación de un átomo central o átomos centrales con ligandos asociados. El sistema de adición particular, que se usa para los compuestos de coordinación (véase Capítulo IR-9), se conoce a veces como nomenclatura de coordinación aunque puede usarse para clases de compuestos mucho más amplias, como se muestra para los ácidos inorgánicos (Capítulo IR-8), para los compuestos organometálicos (Capítulo IR-10) y para un gran número de moléculas sencillas e iones que se nombran en la Tabla IX. Existe otro sistema de adición diseñado a medida para nombrar cadenas y ciclos (Sección IR-7.4; véase el ejemplo 6 siguiente).

Las reglas de estos sistemas establecen los nombres de los ligandos y las instrucciones de uso para el orden de citación de los nombres de los ligandos y de los átomos centrales, la designación de la carga o de los electrones desapareados en las especies, la designación del o de los puntos de unión de ligandos complicados, la designación de relaciones espaciales, etc.

Ejemplos:

- 1. PCl₃, triclorurofosforo
- 2. [CoCl₃(NH₃)₃], triamminotriclorurocobalto

- 3. $H_3SO_4^+$ (= $SO(OH)_3^+$), trihidroxidooxidoazufre(1+)
- 4. $[Pt(\eta^2-C_2H_4)Cl_3]^-$, tricloruro(η^2 -eteno)platinato(1–)
- 5. HONH[●], hidrurohidroxidonitrógeno(•)

6.

1,7-diaziundecasulfi-[012.1^{1,7}]diciclo

IR-1.5.3.5 Procedimientos generales para dar nombres

Los tres sistemas de nomenclatura básicos pueden suministrar nombres diferentes pero inequívocos para un compuesto determinado, como se ha demostrado anteriormente para el PCl₃. La elección entre los tres depende de la clase de compuesto inorgánico en cuestión y del grado de detalle que se desea comunicar. Los siguientes ejemplos ilustran los aspectos típicos que se deben considerar antes de decidirse por un nombre.

Ejemplos:

1. NO_2

¿Desea identificar un compuesto con esta fórmula *empírica*, o un compuesto con esta fórmula *molecular*? ¿Desea recalcar que es un radical? ¿Quiere especificar la conectividad ONO?

2. $Al_2(SO_4)_3 \cdot 12H_2O$

¿Quiere indicar que éste es un compuesto constituido por trisulfato de dialuminio y agua en la proporción 1:12 o indicar explícitamente que contiene iones hexaacuoaluminio(3+)?

3. $H_2P_3O_{10}^{3-}$

¿Quiere especificar que esta especie es ácido trifosfórico (tal como se define en la Tabla IR-8.1) del que se han eliminado tres iones hidrógeno(1+)?. ¿Quiere especificar de dónde se han eliminado?

El diagrama de flujo mostrado en la Figura IR-1.1 (véase la página 9) propone las directrices generales para nombrar los compuestos y otras especies.

IR-1.6 CAMBIOS A LAS RECOMENDACIONES ANTERIORES DE LA IUPAC

En esta sección se destacan los cambios significativos que se han llevado a cabo en las actuales recomendaciones respecto de publicaciones anteriores de la IUPAC. En general, dichos cambios se han introducido para generar una nomenclatura más lógica y coherente, dentro de lo posible, y en línea con la de *Nomenclatura de Química Orgánica. Recomendaciones IUPAC*, Royal Society of Chemistry, en preparación (referencia 21).

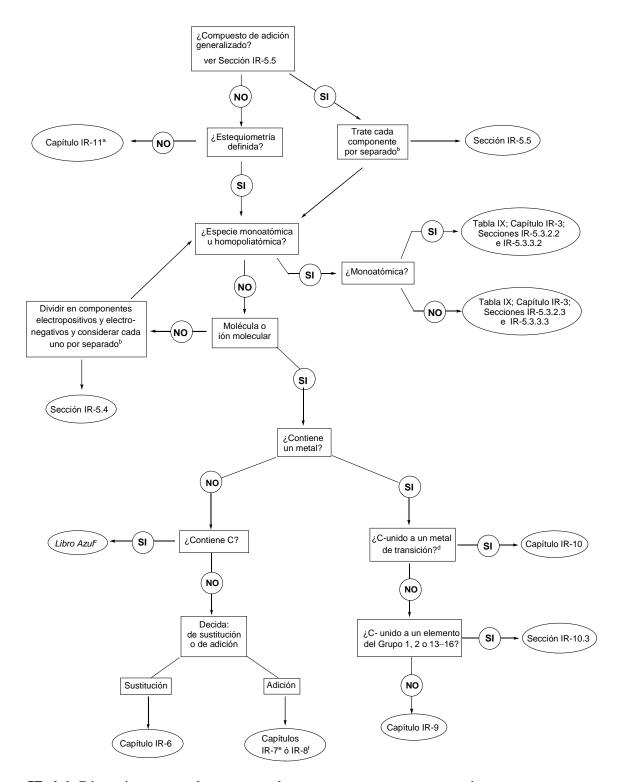


Figura IR-1.1. Directrices generales para nombrar compuestos y otras especies

^a El Capítulo IR-11 trata de la nomenclatura del estado sólido.

b Los componentes individuales se nombran siguiendo el modo indicado para cada uno de ellos. El nombre completo se construye según las recomendaciones de la sección indicada en el Capítulo IR-5.

^c En principio, el compuesto está fuera del alcance de este libro. Algunos compuestos de carbono se encuentran en las Tablas IR-8.1, IR-8.2 y IX, en caso contrario se remite al lector a *Nomenclatura de compuestos orgánicos (Libro Azul)*.

^d Los cianuros unidos por el carbono [*C-bonded*] se consideran compuestos de coordinación, véase el Capítulo IR-9.

^e La especie puede nombrarse como un compuesto de coordinación (Secciones IR-7.1–IR-7.3) o como una cadena o ciclo (Sección IR-7.4).

^f Para ácidos inorgánicos.

IR-1.6.1 Nombres de los cationes

A algunos cationes derivados de hidruros progenitores se les dieron nombres en las referencias 11 y 19 que aparentan ser de sustitución, pero que no siguen las reglas de la nomenclatura de sustitución. Por ejemplo, según las referencias 11 y 19, N₂H₆²⁺ puede llamarse hidrazinio(2+). Sin embargo, la desinencia '-io' denota, por sí misma, la adición de hidrógeno(1+) y, por tanto, implica la carga. Consecuentemente, este catión se denomina hidrazinadiio o diazanodiio sin número de carga, tanto en la Sección IR-6.4.1 como en la referencia 21.

IR-1.6.2 Nombres de los aniones

Al construir los nombres sistemáticos de los aniones se logra una coherencia interna al adherirse, sin excepciones, a las siguientes reglas:

(i) Los nombres de composición de aniones homopoliatómicos acaban en '-uro'.

Ejemplos:

- 1. I_3^- , triyoduro(1–)
- 2. O_2^{2-} , dióxido(2–)
- (ii) Los nombres de los aniones basados en hidruros progenitores por eliminación formal de hidrógeno(1+) finalizan en '-uro'.

Ejemplos:

- 3. HNNH, hidrazina-1,2-diuro
- 4. MeNH⁻, metanaminuro
- 5. porfirina-21,23-diuro
- (iii) Los nombres de adición de los aniones acaban en '-ato'.

Ejemplo:

6. PS_4^{3-} , tetrasulfurofosfato(3-)

Estas reglas se aplican independientemente de que el anión sea o no sea un radical, lo que conduce a cambiar los nombres de adición de algunos radicales aniónicos de la referencia 22. Por ejemplo HSSH^{•-}, que se denominó bis(hidrurosulfuro)(S—S)(•1–),²² se llama ahora bis(hidrurosulfato)(S—S)(•1–).

También hay diferencias respecto de las referencias 11 y 19 en las que a algunos aniones basados en hidruros progenitores les faltaban los localizadores y tenían números de carga adicionales. Por ejemplo, uno de los nombres de "HNNH" era hidrazida(2–), mientras que ahora es hidrazina-1,2-diuro.

IR-1.6.3 La secuencia de los elementos de la Tabla VI

La posición del oxígeno en algunas secuencias de los elementos en *Nomenclatura de Química Inorgánica, Recomendaciones IUPAC de 1990* (referencia 11) se trató como una excepción. Dichas excepciones se han eliminado y actualmente se sigue estrictamente la secuencia de los elementos de la Tabla VI. En particular, el oxígeno se trata como el componente electropositivo respecto de

cualquier halógeno en la construcción de los nombres de composición (Sección IR-5.2) y en las correspondientes fórmulas de compuestos binarios (Sección IR-4.4.3). Esto genera la fórmula O₂Cl y el nombre cloruro de dioxígeno, por ejemplo, en lugar de la fórmula ClO₂ y del nombre dióxido de cloro.

Las fórmulas de los compuestos intermetálicos también estaban sometidas en la referencia 11 a una regla excepcional, aunque no se había dado una guía para nombrar dichos compuestos ni se había definido el término 'compuesto intermetálico'. El problema radica en definir el término 'metal'. Por tanto, ahora no se ha intentado dar una recomendación particular para las fórmulas o los nombres de los compuestos intermetálicos. No obstante, se recalca que las recomendaciones actuales permiten cierta flexibilidad respecto a las fórmulas y los nombres de composición de compuestos ternarios, cuaternarios, etc. Varios principios de ordenación son, a menudo, igualmente aceptables (véanse las Secciones IR-4.4.2 e IR-4.4.3).

La secuencia de los elementos de la Tabla VI también es válida para ordenar los átomos centrales en compuestos polinucleares con el fin de construir los nombres de adición (véase la Sección IR-1.6.6).

IR-1.6.4 Nombres de los ligandos aniónicos en entidades de coordinación (formales)

La regla que se usa ahora sin excepciones es que los nombres de los aniones que terminan en '-*uro*', '-*ito*' y '-*ato*' no se modifican en la nomenclatura de adición cuando actúan como ligandos (Secciones IR-7.1.3 e IR-9.2.2.3). Ésto implica varios cambios respecto a las referencias 11 y 12.

Algunos ligandos sencillos se han representado históricamente –y en la referencia 11– en los nombres por formas abreviadas: fluoro, cloro, bromo, yodo, hidroxo, hidro, ciano, oxo, etc. Siguiendo la regla anterior, ahora son: fluoruro, cloruro, bromuro, yoduro, hidróxido, hidruro, cianuro, óxido, etc. En particular, tio se reserva para la nomenclatura de reemplazo funcional (véase la Sección IR-8.6) y el nombre del ligando S^{2–} es sulfuro.

En varios casos, los nombres de ligandos formalmente aniónicos han cambiado como consecuencia de las modificaciones de la nomenclatura de los propios aniones (véase la Sección IR-1.6.2). Por ejemplo, el ligando "HNNH" se llama ahora hidrazina-1,2-diuro (ejemplo 3 de la Sección IR-1.6.2) y HNCO•, que era (hidruronitruro)oxidocarbonato(•1–) en la referencia 22, ahora se llama (hidruronitrato)oxidocarbonato(•1–).

Se ha dedicado una particular atención a proporcionar los nombres correctos de los ligandos orgánicos y sus terminaciones. Así, con referencia a los ejemplos 4 y 5 de la Sección IR-1.6.2, se usa ahora metanaminuro en lugar de metaminato y un ligando porfirina se llama ahora porfirina-21,23-diuro en lugar de porfirinato(2–), que se usó en la referencia 11.

Los nombres sistemáticos de los ligandos orgánicos de la Tabla VII ahora se encuentran en conformidad con los nombres de los aniones derivados de las reglas de la referencia 21. En muchos casos difieren de los nombres que se dieron como sistemáticos en la referencia 11.

IR-1.6.5 Fórmulas de las entidades de coordinación (formales)

En las fórmulas de las entidades de coordinación, los ligandos se ordenan ahora alfabéticamente según la abreviatura de la fórmula usada para el ligando e independientemente de su carga (Secciones IR-4.4.3.2 e IR-9.2.3.1).

En la referencia 11, los ligandos cargados se citaban antes que los ligandos neutros. Así,

-

^{**} NT. La regla en inglés se refiere al cambio de las terminaciones '-ide', '-ite' y '-ate' de los aniones en '-ido', '-ito' y '-ato', respectivamente, para usarlos como nombres de ligandos en la nomenclatura de adición. Dicho cambio no tiene efecto en español.

estaban en uso dos principios de ordenación sin otra razón obvia que la tradición, de modo que, viendo la fórmula se tenía que decidir si un ligando particular estaba cargado o no y dicha decisión no es siempre inmediata. Así, por ejemplo, la fórmula recomendada ahora para la sal de Zeise es $[Pt(\eta^2-C_2H_4)Cl_3]^-$, mientras que en la referencia 11 era $[PtCl_3(\eta^2-C_2H_4)]^-$ porque el cloruro es aniónico.

IR-1.6.6 Nombres de adición de las entidades polinucleares

El sistema desarrollado en la referencia 11 para los nombres de adición de las entidades di y polinucleares se ha clarificado y cambiado en cierta medida por coherencia: ahora, el orden de citación de los átomos centrales en los nombres es siempre aquel en el que aparecen en la Tabla VI, citándose primero el elemento que aparece en último lugar (véanse las Secciones IR-7.3.2 e IR-9.2.5.6).

El sistema puede usarse para entidades polinucleares con cualesquiera átomos centrales. En este sistema, el orden de los átomos centrales en el nombre refleja el orden con el que se asignan los localizadores usados en el convenio kappa (Sección IR-9.2.4.2) para especificar qué átomo ligante está coordinado a qué átomos centrales. Los símbolos atómicos que se usan al final del nombre para indicar el enlace metal-metal se ordenan de modo similar. Así, por ejemplo, $[(CO)_5ReCo(CO)_4]$ se llama ahora nonacarbonil- $1\kappa^5C$, $2\kappa^4C$ -reniocobalto(Re—Co) en lugar de nonacarbonil- $1\kappa^5C$, $2\kappa^4C$ -cobaltorenio(Co—Re)[#], como en la referencia 11.

IR-1.6.7 Nombres de los ácidos inorgánicos

Los nombres de los ácidos inorgánicos se tratan por separado en el Capítulo IR-8. Los nombres descritos en la referencia 11 bajo el encabezamiento 'nomenclatura ácida', v.g., ácido tetraoxosulfúrico, ácido trioxoclórico(V), se han abandonado. Además, el formato de los nombres descritos en la referencia 11 bajo el encabezamiento 'nomenclatura de hidrógeno' se ha cambiado de forma que la palabra 'hidrogeno'* se une directamente a la segunda parte del nombre y ésta se encuentra siempre entre signos de inclusión. El número de carga al final del nombre es la carga total.

Ejemplos:

1. HCrO₄⁻, hidrogeno(tetraoxidocromato)(1–)

2. H₂NO₃⁺, dihidrogeno(trioxidonitrato)(1+)

En la Sección IR-8.5 se encuentra una lista restringida de nombres de este tipo en los que se pueden omitir los signos de inclusión y el número de carga (hidrogenocarbonato, dihidrogenofosfato y algunos más). Estos nombres no difieren de los de la referencia 11.

Sin embargo, el principio fundamental es el uso de la nomenclatura de adición para derivar sistemáticamente los nombres de los ácidos inorgánicos. Por ejemplo, el nombre sistemático de dihidrogenofosfato, $H_2PO_4^-$, es dihidroxidodioxidofosfato(1–).

Los nombres progenitores de varios ácidos inorgánicos, usados en nomenclatura orgánica como progenitores de funciones, están permitidos en las actuales recomendaciones de forma coherente, aunque los nombres de adición completamente sistemáticos se encuentran en el Capítulo IR-8 para todos los casos. Algunos ejemplos son el ácido fosfinoso, el ácido brómico y el ácido

[#] NT. En castellano, debería escribirse la palabra cobaltorrenio, pero se ha preferido mantener el nombre de los elementos metálicos uno a continuación del otro sin modificar su grafía.

^{*} NT. El término hidrógeno en el nombre del compuesto se escribe sin acento.

peroxidisulfúrico. (Algunos de estos nombres estaban ausentes en la referencia 11)

IR-1.6.8 Compuestos de adición

Se ha racionalizado el formalismo de los compuestos de adición y de otros compuestos tratados como tales (véanse las Secciones IR-4.4.3.5 e IR-5.5), tanto para eliminar el tratamiento excepcional de parte de los compuestos de boro como para hacer que la construcción de un nombre sea autosuficiente en lugar de que dependa de la fórmula. Así, al considerar formalmente a la carnalita, una sal doble, como un compuesto de adición se le da la fórmula:

$KCl \cdot MgCl_2 \cdot 6H_2O$

(las fórmulas de los compuestos se ordenan alfabéticamente y el agua todavía se coloca en último lugar)

y el nombre:

cloruro de magnesio—cloruro de potasio—agua (1/1/6) (*los nombres* de los componentes se ordenan alfabéticamente)

IR-1.6.9 Miscelánea

- (i) En las actuales recomendaciones el punto de radical se considera opcional en las fórmulas y en los nombres, mientras que en la referencia 22 el punto no se omite en ningún nombre sistemático. Por ejemplo, en la referencia 22, NO se representa como NO[•] con el nombre oxidonitrógeno(•).
- (ii) El orden de los signos de inclusión (Sección IR-2.2.1) se ha cambiado respecto del dado en la referencia 11 para asegurar la coherencia con la referencia 21.
- (iii) Algunos nombres se anunciaron como 'preferidos' en las referencias 20 y 22. Este anuncio fue prematuro y, como se explicó en el Prefacio, no se han seleccionado nombres preferidos en las actuales recomendaciones.

IR-1.7 RECOMENDACIONES DE NOMENCLATURA EN OTRAS ÁREAS DE LA QUÍMICA

La nomenclatura inorgánica, como la propia química inorgánica, se desarrolla concertadamente con las de otros campos de la química. Quienes trabajan en áreas interdisciplinarias encontrarán de gran utilidad los textos de la IUPAC sobre principios generales de nomenclatura química, ²³ así como los temas específicos de química orgánica, ²¹ bioquímica, ²⁴ analítica, ²⁵ y macromolecular. ²⁶ Otras publicaciones de la IUPAC incluyen un glosario de términos en química bioinorgánica, ²⁷ un compendio de la terminología química ²⁸ y las magnitudes, unidades y símbolos en química física. ^{29,#} Otros textos relativos a la nomenclatura química se incluyen en la referencia 30.

_

^{**} NT. Magnitudes, Unidades y Símbolos en Química Física, I. Mills, T. Cvitas, K. Homann, N. Kallay, y K. Kuchitsu (Eds.), 2ª edición. Versión española elaborada por Andrés Pérez Masiá, José M. Guil, Josefa E. Herrero, y Anselmo Ruiz Paniego. Editorial Centro de Estudios Ramón Areces, S.A., Madrid, 1999.

IR-1.8 REFERENCIAS

- 1. L. B. Guyton de Morveau, J. Phys., **19**, 310 (1782); Ann. Chim. Phys., **1**, 24 (1798).
- 2. L. B. Guyton de Morveau, A. L. Lavoisier, C. L. Berthollet y A. F. de Fourcroy, *Méthode de Nomenclature Chimique*, París, 1787.
- 3. A. L. Lavoisier, *Traité Elémentaire de Chimie*, 3^a Ed., Deterville, París, 1801, Vol. I, p. 70–81 y Vol. II.
- 4. J. J. Berzelius, Journal de Physique, de Chimie, et d'Histoire Naturelle, 73, 253 (1811).
- 5. A. Werner, *Neuere Anschauungen auf den Gebiete der Anorganischen Chemie*, 3^a Ed., Vieweg, Braunschweig, 1913, p. 92–95.
- 6. Bull. Soc. Chem. (Paris), **3**(7), XIII (1892).
- 7. W. P. Jorissen, H. Bassett, A. Damiens, F. Fichter y H. Remy, *Ber. Dtsch. Chem. Ges. A*, **73**, 53-70 (1940); *J. Chem. Soc.*, 1404–1415 (1940); *J. Am. Chem. Soc.*, **63**, 889–897 (1941).
- 8. *Nomenclature of Inorganic Chemistry*, 1957 Report of CNIC, IUPAC, Butterworths Scientific Publications, London, 1959; *J. Am. Chem. Soc.*, **82**, 5523–5544 (1960).
- 9. Nomenclature of Inorganic Chemistry. Definitive Rules 1970, 2ª Ed., Butterworths, London, 1971.
- 10. How to Name an Inorganic Substance. A Guide to the Use of Nomenclature of Inorganic Chemistry: Definitive Rules 1970, Pergamon Press, Oxford, 1977.
- 11. Nomenclature of Inorganic Chemistry, IUPAC Recommendations 1990, G. J. Leigh (Ed.), Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1990.
- 12. Nomenclature of Polyanions, Y. Jeannin y M. Fournier, *Pure Appl. Chem.*, **59**, 1529–1548 (1987).
- 13. Nomenclature of Tetrapyrroles, Recommendations 1986, G. P. Moss, *Pure Appl. Chem.*, **59**, 779–832 (1987); Nomenclature of Tetrapyrroles, Recommendations 1978, J. E. Merrit y K. L. Loening, *Pure Appl. Chem.*, **51**, 2251–2304 (1979).
- 14. Nomenclature of Inorganic Chains and Ring Compounds, E. O. Fluck y R. S. Laitinen, *Pure Appl. Chem.*, **69**, 1659–1692 (1997).
- 15. Nomenclature and Terminology of Graphite Intercalation Compounds, H.-P. Boehm, R. Setton y E. Stumpp, *Pure Appl. Chem.*, **66**, 1893–1901 (1994).
- 16. Isotopically Modified Compounds, W. C. Fernelius, T. D. Coyle y W. H. Powell, *Pure Appl. Chem.*, **53**, 1887–1900 (1981).
- 17. The Nomenclature of Hydrides of Nitrogen and Derived Cations, Anions, and Ligands, J. Chatt, *Pure Appl. Chem.*, **54**, 2545–2552 (1982).
- 18. Nomenclature for Regular Single-strand and Quasi Single-strand Inorganic and Coordination Polymers, L. G. Donamura, B. P. Block, K. L. Loening, N. Platé T. Tsuruta, K. Ch. Buschbeck, W. H. Powell y J. Reedijk, *Pure Appl. Chem.* **57**, 149–168 (1985).
- 19. *Nomenclature of Inorganic Chemistry II, IUPAC Recommendations 2000*, J. A. McCleverty y N. G. Connelly (Eds.), Royal Society of Chemistry, 2001 (El *Libro Rojo II*).

- 20. Nomenclature of Organometallic Compounds of the Transition Elements, A. Salzer, *Pure Appl. Chem.*, **71**, 1557–1585 (1999).
- Nomenclature of Organic Chemistry, IUPAC Recommendations, W. H. Powell y H. Fabre (Eds.), Royal Society of Chemistry, en preparación. [Véase también, Nomenclature of Organic Chemistry, Pergamon Press, Oxford, 1979; A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds, Recommendations 1993, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1993 y correcciones en Pure Appl. Chem., 71, 1327–1330 (1999)].
- 22. Names for Inorganic Radicals, W. H. Koppenol, Pure Appl. Chem. 72, 437–446 (2000).
- 23. Principles of Chemical Nomenclature, A Guide to IUPAC Recommendations, G. J. Leigh, H. A. Favre y W. V. Metanomski, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1998.
- 24. *Biochemical Nomenclature and Related Documents*, para IUBMB, C. Liébecq, Portland Press Ltd., Londres, 1992 (El *Libro Blanco*).
- 25. Compendium of Analytical Nomenclature, Definitive Rules, 1997, 3^a Ed., J. Inczedy, T. Lengyel y A. M. Ure, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1998 (El *Libro Naranja*).
- 26. Compendium of Macromolecular Nomenclature, W. V. Metanomski (Ed.), Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1991. (El Libro Púrpura. La publicación de la segunda edición se planeó en 2005). Véase también Glossary of Basic Terms in Polymer Science, A. D. Jenkins, P. Kratochvíl, R. F. T. Stepto y U. W. Suter, Pure Appl. Chem., 68, 2287–2311 (1996); Nomenclature of Regular Single-strand Organic Polymers, J. Kahovec, R. B. Fox y K. Hatada, Pure Appl. Chem., 74, 1921–1956 (2002).
- 27. Glossary of Terms used in Bioinorganic Chemistry, M. W. G. de Bolster, *Pure Appl. Chem.*, **69**, 1251–1303 (1997).
- 28. Compendium of Chemical Terminology, IUPAC Recommendations, 2^a Ed., A. D. McNaught y A. Wilkinson (Eds.), Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1997 (El Libro Dorado)
- 29. *Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry,* 2^a Ed., I. Mills, T. Cvitas, K. Homann, N. Kallay y K. Kuchitsu (Eds.), Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1993 (El *Libro Verde*. La publicación de la tercera edición se planificó en 2005).
- 30. Nomenclature of Coordination Compounds, T. E. Sloan, Vol. 1, Cap. 3, Comprehensive Coordination Chemistry, Pergamon Press, 1987; Inorganic Chemical Nomenclature, Principles and Practice, B. P. Block, W. H. Powell y W. C. Fernelius, American Chemical Society, Washington, DC, 1990; Chemical Nomenclature, K. J. Thurlow, Kluwer Academic Pub., 1998.

IR-2 Gramática

CONTENIDO

IR-2.1 Introducción
IR-2.2 Signos de inclusión
IR-2.2.1 Generalidades
IR-2.2.2 Corchetes
IR-2.2.2.1 Uso en las fórmulas
IR-2.2.2.2 Uso en los nombres
IR-2.2.3 Paréntesis
IR-2.2.3.1 Uso en las fórmulas
IR-2.2.3.2 Uso en los nombres
IR-2.2.4 Llaves
IR-2.3 Guiones, signos más y menos, guiones extralargos e indicadores de enlace
IR-2.3.1 Guiones
IR-2.3.2 Signos más y menos
IR-2.3.3 Guiones extralargos
IR-2.3.4 Indicadores especiales de enlace para fórmulas en línea
IR-2.4 Barras
IR-2.5 Puntos, dos puntos, comas, punto y coma
IR-2.5.1 Puntos
IR-2.5.2 Dos puntos
IR-2.5.3 Comas
IR-2.5.4 Punto y coma
IR-2.6 Espacios
IR-2.7 Elisiones
IR-2.8 Números
IR-2.8.1 Números arábigos
IR-2.8.2 Números romanos
IR-2.9 Letras cursivas (itálicas)
IR-2.10 Alfabeto griego
IR-2.11 Asteriscos
IR-2.12 Primas
IR-2.13 Prefijos multiplicadores
IR-2.14 Localizadores
IR-2.14.1 Introducción
IR-2.14.2 Números arábigos
IR-2.14.3 Letras localizadoras
IR-2.15 Principios de ordenación
IR-2.15.1 Introducción
IR-2.15.2 Orden alfabético
IR-2.15.3 Otras reglas de ordenación
IR-2.15.3.1 Orden de los elementos según la tabla periódica
IR-2.15.3.2 Orden de los hidruros progenitores
IR-2.15.3.3 Orden de los grupos característicos en la nomenclatura de sustitución
IR-2.15.3.4 Orden de los ligandos en las fórmulas y en los nombres

IR-2.15.3.5 Orden de los componentes en las fórmulas y en los nombres de las sales

IR-2.15.3.6 Modificación isotópica

IR-2.15.3.7 Prioridades estereoquímicas

IR-2.15.3.8 Orden jerárquico de los signos puntuación

IR-2.16 Notas finales

IR-2.17 Referencias

IR-2.1 INTRODUCCIÓN

La nomenclatura química puede considerarse como un idioma. Como tal, consta de palabras y debe obedecer a unas reglas de sintaxis.

En el lenguaje de la nomenclatura química, las palabras son los nombres de los átomos. De la misma forma en que se unen las palabras para formar una frase, se unen los nombres de los elementos para formar los nombres de los compuestos químicos. La sintaxis es el conjunto de reglas gramaticales para construir frases a partir de las palabras. En la nomenclatura, esta sintaxis incluye el uso de símbolos, tales como puntos, comas y guiones, el uso de números en determinados lugares por razones oportunas y el orden de citación de las palabras, sílabas y símbolos.

Generalmente, los sistemas de nomenclatura parten de una raíz sobre la que se construye el nombre. Esta raíz puede ser el nombre de un elemento –por ejemplo, 'cobalto' o 'silicio' – para utilizarlo en nomenclatura de adición. La raíz también puede derivarse del nombre de un elemento –por ejemplo, 'sil' de 'silicio', 'plumb' de 'plumbum' para el plomo– que, una vez elaborado, produce el nombre de un hidruro progenitor –por ejemplo, 'silano' o 'plumbano' – para usarlo en nomenclatura de sustitución.

Los nombres se construyen añadiéndoles otras unidades a estas raíces. Entre las unidades más importantes están los afijos. Éstos son sílabas que se añaden a palabras o a raíces y pueden ser sufijos, prefijos, o infijos, según se coloquen después, antes, o dentro de una palabra o raíz, respectivamente.

Los sufijos y las terminaciones son de muchos tipos diferentes (Tabla III)* y cada uno de ellos transmite una información específica. Los siguientes ejemplos ilustran ciertos usos particulares. En la nomenclatura de sustitución, pueden especificar el grado de insaturación de un compuesto progenitor: hex*ano*, hex*eno*; y fosf*ano*, difosf*eno*, difosf*ino*. Otras terminaciones indican la naturaleza de la carga que lleva el compuesto; cobalt*ato*, se refiere a un anión. Otros sufijos adicionales pueden indicar que el nombre se refiere a un grupo, como en hex*ilo*.

Los prefijos indican, por ejemplo, los sustituyentes en la nomenclatura de sustitución, como en el nombre *cloro*trisilano, y los ligandos en la nomenclatura de adición, como en el nombre *acuo*cobalto. Los prefijos multiplicadores (Tabla IV) se pueden usar para indicar el número de constituyentes o ligandos, v.g., *hexa*acuocobalto. Los prefijos se pueden usar también para describir los tipos estructurales u otras características estructurales de las especies. Algunos de estos prefijos geométricos y estructurales se encuentran en la Tabla V. La ordenación de los prefijos en la nomenclatura de sustitución se trata en el Capítulo IR-6 y en la nomenclatura de adición en los Capítulos IR-7, IR-9 e IR-10.

Pueden utilizarse otros medios para completar la descripción de un compuesto. Éstos

-

st La tablas numeradas con números romanos se encuentran juntas al final de este libro.

incluyen el número de carga [Ewens-Basset], para indicar la carga iónica, v.g., hexaacuocobalto(2+), y, alternativamente, el número de oxidación [Stock], para indicar el estado de oxidación del átomo central, v.g., hexaacuocobalto(II).

La designación del átomo central y de los ligandos, que generalmente resulta sencilla en los complejos mononucleares, es más difícil en los polinucleares, donde hay que nombrar varios átomos centrales en el compuesto, v.g., en los compuestos de coordinación polinucleares y en los compuestos en cadena y cíclicos. En cada caso particular se tiene que establecer un orden de prioridad (precedencia) o de jerarquía. En la nomenclatura de sustitución, la jerarquía de grupos funcionales es una característica bien establecida; la Tabla VI muestra una secuencia de precedencia de los elementos utilizada en las nomenclaturas de composición y de adición.

El propósito de este capítulo es guiar a los usuarios de la nomenclatura en la construcción del nombre o de la fórmula de un compuesto inorgánico y ayudarles a comprobar que el nombre o la fórmula, que han deducido, obedece completamente los principios establecidos. A continuación, se describen sucesivamente los diversos dispositivos usados para los nombres (o las fórmulas), junto con sus significados y campos de aplicación.

IR-2.2 SIGNOS DE INCLUSIÓN

IR-2.2.1 Generalidades

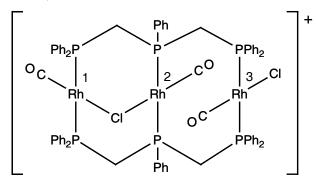
La nomenclatura química emplea tres tipos de signos de inclusión: las llaves { }, los corchetes [] y los paréntesis ().

En las *fórmulas*, los corchetes, paréntesis y llaves se colocan en el siguiente orden: [], [()], $[\{()\}], [(\{()\})], [\{(\{()\})\}],$ etc. Los corchetes se usan normalmente sólo para encerrar una fórmula completa; por tanto, los paréntesis y las llaves se usan alternadamente dentro de los corchetes (véanse también las Secciones IR-4.2.3 e IR-9.2.3.2). Sin embargo, hay algunos usos específicos de los corchetes en las fórmulas (véase la Sección IR-2.2.2.1).

En los *nombres* el orden de colocación es: (), [()], $\{[()]\}$, $\{[()]\}$, etc. Éste es el orden que se usa en la nomenclatura de sustitución; véase la Sección P-16.4 de la referencia 1. (Véase también la Sección IR-9.2.2.3 para el uso de los signos de inclusión con los nombres de los ligandos).

Ejemplo:

1. $[Rh_3Cl(\mu-Cl)(CO)_3\{\mu_3-Ph_2PCH_2P(Ph)CH_2PPh_2\}_2]^+$



tricarbonil- $1\kappa C$, $2\kappa C$, $3\kappa C$ - μ -cloruro- $1:2\kappa^2 Cl$ -cloruro- $3\kappa Cl$ -bis $\{\mu_3$ bis[(difenilfosfanil)- $1\kappa P$ ': $3\kappa P$ "-metil]fenilfosfano- $2\kappa P$ }trirodio(1+)

^{*} NT. En español, debería escribirse la palabra trirrodio, pero se ha preferido mantener el nombre del elemento sin modificar su grafía.

IR-2.2.2 Corchetes

IR-2.2.2.1 Uso en las fórmulas

Los corchetes se usan en las fórmulas en los casos siguientes:

(a) Para encerrar toda la entidad compleja de un compuesto de coordinación neutro.

Ejemplos:

- 1. [Fe(η^5 -C $_5$ H $_5$) $_2$] (para el uso del símbolo η véanse las Secciones IR-9.2.4.3 e IR-10.2.5.1)
- 2. $[Pt(\eta^2-C_2H_4)Cl_2(NH_3)]$
- 3. $[PH(O)(OH)_2]$

Usado en este contexto, al corchete no le debe seguir nunca un subíndice numérico. Por ejemplo, en el caso de que la fórmula molecular sea el doble de la empírica, esto se debe indicar dentro del corchete.

Ejemplo:

La formulación como [$\{Pt(\eta^2-C_2H_4)Cl(\mu-Cl)\}_2$] es más informativa que [$Pt_2(\eta^2-C_2H_4)_2Cl_4$]; la representación [$Pt(\eta^2-C_2H_4)Cl_2$] es incorrecta.

(b) Para encerrar una entidad de coordinación con carga. En este caso, el superíndice que indica la carga se coloca fuera del corchete, al igual que los subíndices que indican el número de iones en la sal.

Ejemplos:

- 5. [BH₄]
- 6. $[Al(OH)(OH_2)_5]^{2+}$
- 7. $[Pt(\eta^2-C_2H_4)Cl_3]^-$
- 8. $Ca[AgF_4]_2$
- 9. $[Co(NH_3)_5(N_3)]SO_4$
- 10. $[S_2O_5]^{2-}$
- 11. $[PW_{12}O_{40}]^{3-}$
- (c) En una sal constituida por catión y anión en la que ambos son entidades de coordinación, cada ion se encierra, por separado, entre corchetes. El catión se coloca delante del anión y no se muestran las cargas individuales. Los subíndices que indican el número de iones complejos en la sal se colocan fuera de los corchetes.

Ejemplos:

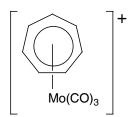
12. $[Co(NH_3)_6][Cr(CN)_6]$ (formada por los iones $[Co(NH_3)_6]^{3+}$ y $[Cr(CN)_6]^{3-}$)

13. $[Co(NH_3)_6]_2[Pt(CN)_4]$ (contiene los iones $[Co(NH_3)_6]^{3+}$ y $[Pt(CN)_4]^{2-}$)

(d) Para incluir fórmulas estructurales.

Ejemplo:

14.



 $[Mo(\eta^7-C_7H_7)(CO)_3]^+$

(e) En química del estado sólido, para indicar un átomo o grupo de átomos en un hueco octaédrico (véase la Sección IR-11.4.3).

Ejemplo:

15.
$$(Mg)[Cr_2]O_4$$

(f) En compuestos marcados específicamente (véase la Sección II-2.4.2.2 de la referencia 2).

Ejemplo:

Obsérvese que esto distingue al compuesto marcado específicamente del compuesto sustituido isotópicamente H₂¹⁵NNH₂.

(g) En compuestos marcados selectivamente (véase la Sección II-2.4.3.2 de la referencia 2).

Ejemplo:

(h) Para indicar unidades repetitivas en compuestos en cadena.

Ejemplo:

IR-2.2.2.2 Uso en los nombres

Los corchetes se usan en los *nombres* en los siguientes casos:

(a) En compuestos marcados específica y selectivamente, el símbolo del nucleido se escribe entre corchetes delante del nombre de la parte del compuesto que está modificado isotópicamente. (Compárese con el uso de paréntesis para los compuestos sustituidos isotópicamente en la Sección IR-2.2.3.2, y véanse también las Secciones II-2.4.2.3, II-2.4.2.4 y II-2.4.3.3 de la referencia 2).

Ejemplos:

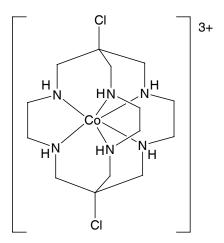
1.
$$[^{15}N]H_2[^2H]$$
 $[^2H_1,^{15}N]$ amoniaco

Para más detalles, véase la Sección II-2.4 de la referencia 2.

(b) Cuando se nombran los ligandos orgánicos y las partes orgánicas de los compuestos de coordinación el uso de los corchetes obedece a los principios de la nomenclatura orgánica.¹

Ejemplo

3.



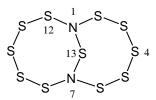
1,8-dicloro-3,6,10,13,16,19-hexaazabiciclo[6.6.6]icosanocobalto(3+)

(c) En la nomenclatura de los compuestos en cadena y cíclicos, los corchetes se usan para encerrar al descriptor nodal (Sección IR-7.4.2 y Capítulo II-5 de la referencia 2).

Ejemplos:

4. HSSH[•] 1,4-dihidroni-2,3-disulfi-[4]catenato(•1-)

5.



1,7-diaziundecasulfi-[012.1^{1,7}]diciclo

IR-2.2.3 Paréntesis

IR-2.2.3.1 Uso en las fórmulas

Los paréntesis se usan en las fórmulas con los siguientes fines:

(a) Para encerrar las fórmulas de grupos de átomos (los grupos pueden ser iones, grupos sustituyentes, ligandos o moléculas) y, así evitar ambigüedades, o cuando el grupo está multiplicado. En este caso, al paréntesis de cierre le sigue un subíndice multiplicador. En el caso de que los iones sean comunes, como nitrato y sulfato, se recomienda el uso de los paréntesis, aunque no es obligatorio.

Ejemplos:

1. $Ca_3(PO_4)_2$

- 2. $[Te(N_3)_6]$
- 3. $(NO_3)^-$ o NO_3^-
- 4. $[FeH(H_2)(Ph_2PCH_2CH_2PPh_2]^+$
- 5. PH(O)(OH)₂
- 6. $[Co(NH_3)(ONO)][PF_6]_2$
- (b) Para encerrar la abreviatura del nombre de un ligando en las fórmulas. En las Tablas VII y VIII se incluyen listas de las abreviaturas recomendadas para los ligandos. (Véanse también las Secciones IR-4.4.4 y IR-9.2.3.4).

Ejemplo:

- 7. $[Co(en)_3]^{3+}$
- (c) Para encerrar el punto del radical como superíndice y de su multiplicador en polirradicales, con el fin de evitar ambigüedades respecto al símbolo multiplicador de la carga.

Ejemplo:

- 8. NO^{(2•)-}
- (d) En química del estado sólido, para encerrar los símbolos de los átomos distribuidos al azar que ocupan el mismo tipo de posiciones. Los símbolos se separan por una coma y sin espacio.

Ejemplo:

- 9. K(Br,Cl)
- (e) En química del estado sólido, para indicar que un átomo o grupo de átomos están en un hueco tetraédrico.

Ejemplo:

10.
$$(Mg)[Cr_2]O_4$$

(f) Para indicar la composición de un compuesto no estequiométrico.

Ejemplos:

11.
$$\operatorname{Fe}_{3x}\operatorname{Li}_{4-x}\operatorname{Ti}_{2(1-x)}\operatorname{O}_6$$
 ($x = 0.35$)

12. LaNi₅H_x
$$(0 < x < 66,7)$$

(g) En la notación de Kröger-Vink (véase la Sección IR-11.4), para indicar un defecto complejo.

Ejemplo:

13.
$$(Cr_{Mg}V_{Mg}Cr_{Mg})^x$$

(h) En las sustancias cristalinas, para indicar el tipo de cristal formado (véase Capítulo IR-11).

Ejemplos:

- 14. ZnS(c)
- 15. AuCd (tipo CsCl)
- (i) Para encerrar un símbolo que representa el estado de agregación de una especie química.

Ejemplo:

- 16. HCl(g) cloruro de hidrógeno en estado gaseoso
- (j) En los compuestos ópticamente activos, para encerrar los signos de rotación.

Ejemplo:

17.
$$(+)_{589}$$
-[Co(en)₃]Cl₃

(k) Para encerrar los estereo-descriptores, tales como los descriptores de quiralidad e índices de configuración (véase la Sección IR-9.3.3.2)

Ejemplos:

- 18. (2R,3S)-1,2,3-SiH₂ClSiHClSiHClSiH₂SiH₃
- 19. (OC-6-22)- $[Co(NH_3)_3(NO_2)_3]$
- (l) En los polímeros, la unidad repetitiva se encierra entre paréntesis tachados con el guión superpuesto a los paréntesis que representan el enlace.³

Ejemplo:

20. $(S)_n$

IR-2.2.3.2 Uso en los nombres

Los paréntesis se usan en los *nombres* en los siguientes casos:

(a) Para encerrar los grupos sustituyentes o los nombres de ligandos con el fin de evitar ambigüedades. Por ejemplo, cuando el grupo sustituyente o el nombre del ligando contengan prefijos multiplicadores, tales como (dióxido) o (trifosfato), o cuando el esquema de sustitución no estuviese especificado sin ambigüedad de otro modo, o cuando el grupo sustituyente o el nombre del ligando contiene descriptores numéricos o alfabéticos. Puede ser necesario el uso de diferentes signos de inclusión cuando los nombres de los ligandos o grupos sustituyentes ya contienen paréntesis; compárese con la regla de colocación de la Sección IR-2.2.1.

Ejemplos:

- 1. $[Pt(\eta^2-C_2H_4)Cl_3]^-$ tricloruro(η^2 -eteno)platinato(II)
- 2. [Hg(CHCl₂)Ph] (diclorometil)(fenil)mercurio
- (b) Siguiendo a los prefijos multiplicadores de la serie bis, tris, etc., salvo que deban usarse otros signos de inclusión debido al orden de colocación (véase la Sección IR-2.2.1).

Ejemplos:

- 3. [CuCl₂(NH₂Me)₂] diclorurobis(metilamina)cobre(II)
- 4. Fe_2S_3 tris(sulfuro) de dihierro
- (c) Para encerrar los números de oxidación (Stock) o de carga (Ewens-Bassett).

Ejemplo:

5. Na[B(NO₃)₄] tetranitratoborato(III) de sodio, o tetranitratoborato(1–) de sodio

(d) En los radicales, para encerrar el punto del radical y el numero de carga si conviene.

Ejemplos:

6. ClOO[•] clorurodioxígeno(•)

7. $\operatorname{Cl}_{2}^{\bullet-}$ dicloruro($\bullet 1-$)

(e) Para encerrar las relaciones estequiométricas en los compuestos de adición.

Ejemplo:

8. 8H₂S·46H₂O sulfuro de hidrógeno—agua(8/46)

(f) Para encerrar las letras cursivas que representan enlaces entre dos o más átomos metálicos en los compuestos de coordinación.

Ejemplo:

9. $[Mn_2(CO)_{10}]$ bis(pentacarbonilmanganeso)(Mn—Mn)

(g) Para encerrar los descriptores estereoquímicos (véase la Sección IR-9.3).

Ejemplos:

10.

[CoCl₃(NH₃)₃] (OC-6-22)-triamminotriclorurocobalto(III)

11. (+)₅₈₉-[Co(en)₃]Cl₃ tricloruro de (+)₅₈₉-tris(etano-1,2-diamina)cobalto(III)

12. 1 2 3 4 5
$$(2R,3S)$$
-SiClH₂SiHClSiHClSiH₂SiH₃ $(2R,3S)$ -1,2,3-tricloropentasilano

(h) En los compuestos sustituidos isotópicamente, el (o los) símbolo(s) apropiado(s) del (de los) nucleido(s), se coloca(n) entre paréntesis delante del nombre de la parte del compuesto que está sustituida isotópicamente (véase la Sección II-2.2.3 de la referencia 2). Compárese con el uso de corchetes en compuestos marcados específica y selectivamente descrito en la Sección IR-2.2.2.2(a).

Ejemplo:

13.
$$H^3HO$$
 (3H_1)agua

(i) Para encerrar el número de átomos de hidrógeno en los compuestos de boro.

Ejemplo:

14.
$$B_6H_{10}$$
 hexaborano(10)

(j) En la nomenclatura de hidrógeno (Sección IR-8.4), para encerrar la parte del nombre que sigue a la palabra hidrogeno.

Ejemplo:

15. [HMo₆O₁₉] hidrogeno(nonadecaoxidohexamolibdato)(1–)

IR-2.2.4 Llaves

Las llaves se usan en los *nombres* y en las *fórmulas* en la secuencia jerárquica indicada y ejemplificada en la Sección IR-2.2.1.

IR-2.3 GUIONES, SIGNOS MÁS Y MENOS, GUIONES EXTRALARGOS E INDICADORES DE ENLACE

IR-2.3.1 Guiones#

Los guiones se usan en las fórmulas y en los nombres. Obsérvese que no se dejan espacios a ambos lados de un guión. Se emplean:

(a) Para separar los símbolos como μ (mu), η (eta) y κ (kappa) del resto de la fórmula o del nombre.

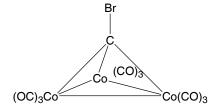
Ejemplo:

1.
$$[{Cr(NH_3)_5}_2(\mu-OH)]^{5+}$$
 μ -hidróxido-bis(pentaamminocromo)(5+)

(b) Para separar del resto de la fórmula o del nombre los indicadores geométricos o estructurales y estereoquímicos, tales como, *ciclo*, *catena*, *triángulo*, *cuadro*, *tetraedro*, *octaedro*, *closo*, *nido*, *aracno*, *cis* y *trans*. En los agregados o clústeres (o cúmulos), los localizadores de posición se separan de forma análoga.

Ejemplo:

2.



μ₃-(bromometanotriil)-ciclo-tris(tricarbonilcobalto)(3 Co—Co)

(c) Para separar los localizadores de posición del resto del nombre.

Ejemplo:

3. SiH₂ClSiHClSiH₂Cl 1,2,3-triclorotrisilano

(d) Para separar el símbolo del nucleido marcado de su localizador en la fórmula de un compuesto marcado selectivamente.

Ejemplo:

4. $[1-^{2}H_{1;2}]SiH_{3}OSiH_{2}OSiH_{3}$

(e) Para separar el nombre de un ligando puente del resto del nombre

^{*} NT. En este libro se hace la distinción del signo menos (–) del guión (-). El primero es más largo que el segundo y se corresponde con el guión de la fuente *Symbol* de *Windows*.

Ejemplo:

4.

[Fe₂(μ -CO)₃(CO)₆] tri- μ -carbonil-bis(tricarbonilhierro)(Fe—Fe)

IR-2.3.2 Signos más y menos

Los signos + y – se usan para indicar la carga de un ion en una fórmula o en un nombre.

Ejemplos:

- 1. Cl⁻
- 2. Fe^{3+}
- 3. $[SO_4]^{2-}$
- 4. $[Co(CO)_4]^-$ tetracarbonilcobaltato(1–)

También pueden indicar el signo de la rotación óptica en la fórmula o el nombre de un compuesto ópticamente activo.

Ejemplo:

5. $(+)_{589}[Co(en)_3]^{3+}$ $(+)_{589}$ -tris(etano-1,2-dimina)cobalto(3+)

IR-2.3.3 Guiones extralargos#

Los guiones extralargos se usan en las *fórmulas* solamente cuando éstas son estructurales. (La notación menos precisa 'guiones largos' se usó en la referencia 4).

En los *nombres*, los guiones extralargos se usan en dos casos.

(a) Para indicar enlaces metal-metal en los compuestos polinucleares. Separan los símbolos de los participantes en el enlace, que se encierran entre paréntesis al final del nombre y escritos en cursiva.

Ejemplo:

1. $[Mn_2(CO)_{10}]$ bis(pentacarbonilmanganeso)(Mn—Mn)

(b) Para separar los constituyentes individuales en los nombres de los compuestos de adición

Ejemplos:

2. 3CdSO₄·8H₂O sulfato de cadmio—agua (3/8)

3. 2CHCl₃·4H₂S·9H₂O cloroformo—sulfuro de hidrógeno—agua (2/4/9)

^{*} NT. Los guiones extralargos (—) son más largos que el normal (-) y que el signo menos (-) y se corresponden exactamente con el espacio que ocupan dos M.

IR-2.3.4 Indicadores especiales de enlace para fórmulas en línea

Los símbolos estructurales — y — pueden usarse en fórmulas lineales para indicar enlaces entre símbolos de átomos no adyacentes.

Ejemplos:

$$[Ni(S=PMe_2)(\eta^5-C_5H_5)]$$

2.

$$[(CO)_{4}Mn - Mo(CO)_{3}]$$

$$[(CO)_{4}MnMo(CO)_{3}(\eta^{5}-C_{5}H_{4}PPh_{2})]$$

3.

$$\begin{array}{c} \text{Et}_{3}\text{P} \\ \text{Cl} \\ \text{PEt}_{3} \\ \\ \text{[(Et}_{3}\text{P)ClPt}(\text{Me}_{2}\text{NCH}_{2}\text{CHCHCH}_{2}\text{NMe}_{2})\text{PtCl}(\text{PEt}_{3})]} \end{array}$$

4.

$$\begin{array}{c|c} & H \\ & C \\ & PPh_2 \\ & (OC)_3Fe \\ \hline & FeH(CO)_3 \\ \hline \\ & [(OC)_3Fe(\mu\text{-Ph}_2PCHPPh}_2)FeH(CO)_3] \end{array}$$

IR-2.4 BARRAS

La barra (/) se usa en los nombres de los compuestos de adición para separar los números arábigos que indican las proporciones de los constituyentes individuales en el compuesto.

Ejemplos:

- 1. BF₃·2H₂O trifluoruro de boro—agua (1/2)
- 2. BiCl₃·3PCl₅ tricloruro de bismuto—pentacloruro de fósforo (1/3)

IR-2.5 PUNTOS, DOS PUNTOS, COMAS, PUNTO Y COMA

IR-2.5.1 **Puntos**

Los puntos se usan en las fórmulas en diversas posiciones.

(a) Como superíndice a la derecha, indican los electrones desapareados en los radicales (véase la Sección IR-4.6.2).

Ejemplos:

- 1. HO*
- 2. $O_2^{2^{\bullet}}$
- (b) Como superíndices a la derecha en la notación Kröger-Vink de la química del estado sólido, indican la unidad de carga efectiva positiva (véase Sección IR-11.4.4).

Ejemplo:

3.
$$\operatorname{Li}_{\operatorname{Li},1-2x}^{\operatorname{X}}\operatorname{Mg}_{\operatorname{Li},x}^{\bullet}V_{\operatorname{Li},x}^{\prime}\operatorname{Cl}_{\operatorname{Cl}}^{\operatorname{X}}$$

(c) Un punto centrado en las *fórmulas* de los compuestos de adición formales, que incluyen a hidratos, aductos, clatratos, sales dobles y óxidos dobles, separa los constituyentes individuales. El punto se escribe en el centro de la línea para distinguirlo de un punto final.

Ejemplos:

- 4. $BF_3 \cdot NH_3$
- 5. ZrCl₂O·8H₂O
- 6. $CuCl_2 \cdot 3Cu(OH)_2$
- 7. $Ta_2O_5\cdot 4WO_3$

Los puntos se usan en los *nombres* de los radicales para indicar la presencia de electrones desapareados.

Ejemplos:

8. ClO[•] oxidocloro(•)
9. Cl₂^{•−} dicloruro(•1−)

IR-2.5.2 **Dos puntos**

Los dos puntos se usan en los *nombres* en los siguientes casos:

(a) En los compuestos de coordinación y organometálicos, para separar los átomos ligantes[#] de un ligando puente entre dos átomos centrales.

Ejemplo:

[{Co(NH₃)₃}₂(μ-NO₂)(μ-OH)₂]³⁺
 di-μ-hidróxido-μ-nitrito-κ*N*:κ*O*-bis(triamminocobalto)(3+)

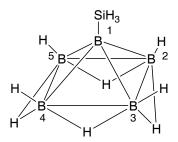
[#] NT. Átomos *ligantes* son los átomos de unión de un ligando a uno o más átomos centrales.

(Véanse también las Secciones IR-9.2.4.2 e IR-10.2.3.3 para el uso de κ y las Secciones IR-9.2.5.2 e IR-10.2.3.1 para el uso de μ).

- (b) En los compuestos de coordinación y organometálicos, para separar los localizadores de átomos centrales cuando un solo átomo ligante o grupos insaturados unen a dos o más átomos centrales. Así, si hubiera un ligando cloruro puente entre los átomos centrales 1 y 2 se indicaría de la siguiente forma: μ -cloruro-1:2 κ^2 Cl; un grupo carbonilo unido de modo terminal al átomo 1 y puente a los átomos 2 y 3 mediante sus electrones π se indicaría como μ_3 -2 η^2 :3 η^2 -carbonilo-1 κ C.
- (c) En los compuestos de boro, para separar los conjuntos de localizadores de los átomos de boro que están conectados mediante átomos de hidrógeno puente.

Ejemplo:

2.



1-silil-2,3:2,5:3,4:4,5-tetra- μ *H*-pentaborano(9)

(d) En la nomenclatura de los compuestos en cadena y cíclicos, para separar los descriptores nodales de los módulos individuales de una \$ construcción (véase la Sección IR-7.4.2).

IR-2.5.3 Comas

Las comas se usan en los siguientes casos:

(a) Para separar los localizadores.

Ejemplo:

- 1. SiH₂ClSiHClSiH₂Cl 1,2,3-triclorosilano
- (b) Para separar los símbolos de los átomos ligantes de un ligando quelato polidentado.

Ejemplo:

- 2. cis-bis(glicinato- $\kappa N, \kappa O$) platino
- (c) En química del estado sólido, para separar los símbolos de los átomos que ocupan el mismo tipo de hueco en una ordenación al azar.

Ejemplo:

- 3. $(Mo,W)_nO_{3n-1}$
- (d) Para separar los números de oxidación (Stock) en un compuesto de valencia mixta.

^{*} NT. Átomos *ligantes* son los átomos de unión de un ligando a uno o más átomos centrales.

Ejemplo:

 $[(NH_3)_5Rh(\mu-pyz)Rh(NH_3)_5]^{5+}$

μ-pirazina-bis(pentaamminorutenio)(II,III)

(e) Para separar los símbolos de los átomos marcados en compuestos marcados selectivamente. (Véase la Sección II-2.4.3.3 de la referencia 2)

Ejemplo:

IR-2.5.4 **Punto y coma**

El punto y coma se usa en los siguientes casos:

- (a) En los nombres de los compuestos de coordinación, para ordenar los localizadores ya separados por comas, como en el convenio kappa. (Véanse los ejemplos en la Sección IR-9.2.5.6)
- (b) Para separar los subíndices que indican los números posibles de nucleidos marcadores en compuestos marcados selectivamente.

Ejemplo:

IR-2.6 ESPACIOS

En la nomenclatura inorgánica, los espacios sólo se usan en los *nombres* según reglas definidas; las normas de uso pueden variar de un idioma a otro. De cualquier modo, los espacios no se usan nunca en las fórmulas.

(a) Para separar los nombres de los iones en las sales; en español se unen mediante preposiciones y conjunciones: 'de', 'y' (también separadas por espacios).

Ejemplos:

- 1. NaCl cloruro de sodio
- 2. NaTl(NO₃)₂ dinitrato de sodio y talio(I)
- (b) En los nombres de los compuestos binarios, para separar la parte electropositiva de la electronegativa (incluyendo la preposición 'de').

Ejemplo:

- 3. P₄O₁₀ decaóxido de tetrafósforo
- (c) Para separar los números arábigos de los símbolos de los átomos centrales en el descriptor de enlace en el nombre de una entidad polinuclear que tiene varios enlaces directos entre los átomos centrales.

Ejemplo:

4.
$$[Os_3(CO)_{12}]$$
 ciclo-tris(tetracarbonilosmio)(3 *Os*—*Os*)

(d) En los compuestos de adición, para separar el descriptor estequiométrico del resto del nombre.

Ejemplo:

(e) En la química del estado sólido, para separar la fórmula del tipo estructural.

Ejemplo:

6. $TiO_2(o)^{\#}$ (tipo *brookita*)

IR-2.7 ELISIONES

En general, no se hacen elisiones en las nomenclaturas de adición y de composición cuando se usan prefijos multiplicadores.

Ejemplo:

- 1. tetraacuo (no es tetracuo)
- 2. monooxígeno (no es monoxígeno)
- hexaóxido de tetraarsénico

Sin embargo, una excepción permitida es monóxido, en lugar de monoóxido debido a su uso generalizado.

IR-2.8 NÚMEROS

IR-2.8.1 Números arábigos

Los números arábigos tienen una importancia crucial en nomenclatura; su colocación en una fórmula o nombre tiene un significado especial.

Se usan en las *fórmulas* de muchas formas.

(a) Como subíndices a la derecha, para indicar el número de constituyentes individuales (átomos o grupos de átomos). La unidad se omite.

Ejemplos:

1. CaCl₂

2. $[Co(NH_3)_6]Cl_3$

(b) Como un superíndice a la derecha, para indicar el número de carga. No se escribe el número uno.

[#] NT. Este sistema se conoce en español como rómbico. Sin embargo, se ha traducido por ortorrómbico para respetar los símbolos internacionales de Pearson y la grafía del tipo estructural.

Ejemplos:

- 3. Cl⁻
- 4. NO⁺
- 5. Cu²⁺
- 6. $[Al(H_2O)_6]^{3+}$
- (c) Para indicar la composición de los compuestos de adición o de los compuestos noestequiométricos. El número se escribe en la misma línea antes de la fórmula de cada constituyente, excepto la unidad, que se omite.

Ejemplos:

- 7. Na₂CO₃·10H₂O
- 8. 8WO₃·9Nb₂O₅
- (d) Para designar el número de masa y/o el número atómico de los nucleidos representados por sus símbolos. El número de masa se escribe como un superíndice a la izquierda y el número atómico como un subíndice a la izquierda.

Ejemplos:

- 9. ¹⁸O
- 10. ${}_{1}^{3}H$
- (e) Como un superíndice a la derecha del símbolo η , para indicar la hapticidad[#] de un ligando (véanse las Secciones IR-9.2.4.3 e IR-10.2.5.1).

Ejemplo:

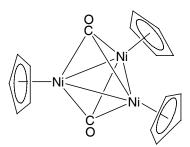
11.
$$[Fe(\eta^5(C_5H_5)_2)]$$

Los números arábigos también se usan como localizadores en los *nombres* (véase la Sección IR-2.14.2) y en los siguiente casos.

(a) Para indicar el número de enlaces metal-metal en los compuestos polinucleares.

Ejemplo:

12.



di-μ₃-carbonil-*ciclo*-tris(ciclopentadienilníquel)(3 *Ni*—*Ni*)

[#] NT. Se define hapticidad (*hapticity*, en inglés) como el número de átomos contiguos en un ligando coordinados al metal. Se designa por la letra griega eta (η). (Véase la Sección IR-10.2.5.1).

(b) Para indicar la carga.

Ejemplos:

13. $[CoCl(NH_3)_5]^{2+}$ pentaamminoclorurocobalto(2+)

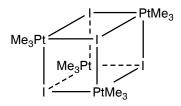
14. [AlCl₄] tetracloruroaluminato(1–)

Obsérvese que se tiene que incluir el número '1' para evitar ambigüedades respecto a los símbolos de rotación óptica [véase la Sección IR-2.2.3.1(j)].

(c) Como un subíndice a la derecha del símbolo μ para indicar la multiplicidad del puente de un ligando (véase la Sección IR-9.2.5.2).

Ejemplo:

15.



[$\{Pt(\mu_3-I)Me_3\}_4$] tetra- μ_3 -yoduro-tetrakis[trimetilplatino(IV)]

(d) En la nomenclatura de los compuestos de boro (véase el Capítulo IR-6.2.3), para indicar el número de átomos de hidrógeno en la molécula del borano progenitor. El número arábigo se encierra entre paréntesis inmediatamente después del nombre.

Ejemplos:

16.
$$B_2H_6$$
 diborano(6)

17.
$$B_{10}H_{14}$$
 decaborano(14)

- (e) Como un superíndice a la derecha del símbolo κ , para indicar el número de átomos dadores de un tipo determinado unidos a un átomo central o átomos centrales (véanse las Secciones IR-9.2.4.2 e IR-10.2.3.3).
- (f) Como un superíndice a la derecha del símbolo η para indicar la hapticidad de un ligando (véanse las Secciones IR-9.2.4.3 e IR-10.2.5.1).
- (g) En estructuras polinucleares, los números arábigos son parte del descriptor CEP (Casey, Evans, Powell),⁵ que se usa para identificar las figuras de los poliedros (véase también la Sección IR-9.2.5.6).
- (h) En el descriptor estequiométrico situado al final del nombre de un compuesto de adición (véase la Sección IR-5.5).

Ejemplo:

(i) Como un superíndice a la derecha, para indicar el número de enlaces inusual en el convenio λ (véase la Sección IR-6.2.1).

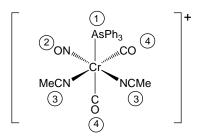
Ejemplo:

19.
$$IH_5$$
 λ^5 -yodano

(j) Para describir la geometría de coordinación y la configuración de los ligandos alrededor de un átomo central mediante los índices de configuración y los símbolos de los poliedros (véanse las Secciones IR-9.3.2 e IR-9.3.3)

Ejemplo:

20.



(*OC*-6-43)-bis(acetonitrilo)dicarbonilnitrosil(trifenilarsano)cromo(1+)

IR-2.8.2 **Números romanos**

Los números romanos se usan en las *fórmulas* como superíndices a la derecha para indicar el estado de oxidación formal.

Ejemplos:

- 1. $[Co^{II}Co^{III}W_{12}O_{42}]^{7-}$
- $2. \quad [Mn^{VII}O_4]^-$
- 3. $Fe^{II}Fe^{III}_2O_4$

En los nombres indican el estado de oxidación formal de un átomo. Se encierran entre paréntesis y siguen inmediatamente al nombre del átomo al que cualifican (sin dejar espacio).

Ejemplos:

- 4. $[Fe(H_2O)_6]^{2+}$ hexaacuohierro(II)
- 5. $[FeO_4]^{2-}$ tetraoxidoferrato(VI)

IR-2.9 LETRAS CURSIVAS (ITÁLICAS)

La letra cursiva (o itálica) se utiliza en los *nombres* como sigue:

- (a) Para indicar los prefijos geométricos y estructurales, tales como *cis, ciclo, catena, triangulo* y *nido* (véase la Tabla V).
- (b) Para designar los símbolos de los átomos centrales en el descriptor de enlace en los compuestos polinucleares.

Ejemplo:

1. $[Mn_2(CO)_{10}]$ bis(pentacarbonilmanganeso)(Mn—Mn)

(c) En los óxidos e hidróxidos dobles, cuando se indica el tipo de estructura.

Ejemplo:

2. MgTiO₃ (tipo *ilmenita*)

(d) En los compuestos de coordinación, para designar los símbolos del átomo o átomos de un ligando (generalmente polidentado) unido al metal, independientemente de que se use o no el convenio kappa. (Véase la Sección IR-9.2.4.4).

Ejemplo:

3.

cis-bis(glicinato- $\kappa N, \kappa O$)platino

- (e) En la química del estado sólido, para referir los símbolos de los sistemas de Pearson y cristalinos. (Véanse las Secciones IR-3.4.4 e IR-11.5).
- (f) Las letras mayúsculas cursivas designan los símbolos de los poliedros. (Véase la Sección IR-9.3.2.1).

Ejemplo:

4.

[CoCl₃(NH₃)₃] (OC-6-22)-triamminotriclorurocobalto(III)

(g) Entre otros usos de las letras mayúsculas cursivas está la de servir de localizadores en la nomenclatura de sustitución (véase por ejemplo la Sección IR-6.2.4.1) y la letra *H* para el hidrógeno indicado (véase por ejemplo la Sección IR-6.2.3.4). Las letras cursivas en minúsculas se usan para representar números, especialmente en fórmulas, cuando los números son indefinidos.

Ejemplos:

- 5. $(HBO_2)_n$
- 6. Feⁿ⁺

IR-2.10 ALFABETO GRIEGO

Las letras griegas (en tipo romano) se usan en la nomenclatura inorgánica sistemática como sigue:

- Δ para mostrar la configuración absoluta, o como un descriptor estructural para designar deltaedros (véase la Sección IR-9.3.4);
- δ para denotar la configuración absoluta de las conformaciones de los anillos quelato (véase la Sección IR-9.3.4); en la química del estado sólido para indicar pequeñas variaciones de la

composición (véase la Sección IR-11.3.2); para designar dobles enlaces acumulados en los ciclos o en los sistemas cíclicos (véase la Sección P-25.7 de la referencia 1);

- η para designar la hapticidad de un ligando (véanse las Secciones IR-9.2.4.3 e IR-10.2.5.1);
- κ como un indicador del átomo ligante en el convenio kappa (véanse las Secciones IR-9.2.4.2 e IR-10.2.3.3);
- Λ para mostrar la configuración absoluta (véase la Sección IR-9.3.4);
- para indicar un número de enlaces inusual en el convenio lambda (véanse las Secciones IR-6.2.1 y P-14.1 de la referencia 1); para identificar la configuración absoluta de las conformaciones de los anillos quelato (véase la Sección IR-9.3.4);
- μ para designar un ligando puente (véanse las Secciones IR-9.2.5.2 e IR-10.2.3.1).

IR-2.11 ASTERISCOS

El asterisco (*) se usa en las *fórmulas* como un superíndice a la derecha del símbolo de un elemento de las siguientes maneras:

(a) Para destacar un centro quiral.

Ejemplo:

1.

$$\begin{array}{c|c} H_2C & H \\ \hline \\ H - C^* - CH_3 \\ \hline \\ CHMe_2 \end{array}$$

Este uso se ha ampliado para etiquetar un ligando quiral o un centro quiral en la química de la coordinación.

Ejemplo:

2.

(b) Para designar un estado excitado, ya sea molecular o nuclear.

Ejemplo:

3. NO*

IR-2.12 PRIMAS

- (a) La prima ('), doble prima ('), triple prima ('), etc. pueden usarse en los nombres y fórmulas de los compuestos de coordinación en los siguientes casos:
- (i) para diferenciar las posiciones de sustitución en los nombres de los ligandos;

- (ii) cuando se especifican los átomos dadores (IR-9.2.4.2), para distinguirlos;
- (iii) cuando se especifican las configuraciones utilizando los índices de configuración (IR-9.3.5.3), para diferenciar entre los átomos dadores de igual prioridad, dependiendo de si están localizados dentro del mismo ligando o en una parte del mismo.

Ejemplo:

1. $[Rh_3Cl(\mu-Cl)(CO)_3\{\mu_3-Ph_2PCH_2P(Ph)CH_2PPh_2\}_2]^+$

$$\begin{bmatrix} Ph_{2}P & Ph_{2} & Ph_{2}$$

tricarbonil- $1\kappa C$, $2\kappa C$, $3\kappa C$ - μ -cloruro- $1:2\kappa^2 Cl$ -cloruro- $3\kappa Cl$ -bis{ μ_3 -bis[(difenilfosfanil)metil]- $1\kappa P$ ': $3\kappa P$ "-fenilfosfano- $2\kappa P$ }trirodio(1+)

(b) La prima, doble prima, triple prima, etc. se usan también como superíndices a la derecha en la notación de Kröger-Vink (véase la Sección IR-11.4), donde indican una posición que tiene una, dos, tres, etc. unidades de carga efectiva negativa, respectivamente.

Ejemplo:

2.
$$\operatorname{Li}_{\operatorname{Li},1-2x}^{\operatorname{X}}\operatorname{Mg}_{\operatorname{Li},x}^{\bullet}V_{\operatorname{Li},x}^{\prime}\operatorname{Cl}_{\operatorname{Cl}}^{\operatorname{X}}$$

IR-2.13 PREFIJOS MULTIPLICADORES

El número de entidades químicas idénticas en un nombre se expresa con un prefijo multiplicador (véase Tabla IV).

En el caso de entidades sencillas como los ligandos monoatómicos, se usan los prefijos multiplicadores di, tri, tetra, penta, etc.

Los prefijos multiplicadores bis, tris, tetrakis, pentakis, etc. se usan para los ligandos de nombres compuestos o para evitar ambigüedades. La entidad modificada se escribe entre paréntesis.

Ejemplos:

1.	Fe_2O_3	trióxido de dihierro
2.	$[PtCl_4]^{2+}$	tetracloruroplatinato(2-)
3.	$[Fe(CCPh)_2(CO)_4]$	tetracarbonilbis(feniletinil)hierro
4.	TlI_3	tris(yoduro) de talio(III) (véase la Sección IR-5.4.2.3)
	TII_3 $Ca_3(PO_4)_2$	tris(yoduro) de talio(III) (véase la Sección IR-5.4.2.3) bis(fosfato) de tricalcio

Los prefijos multiplicadores compuestos se construyen citando primero las unidades, después las decenas, las centenas y así sucesivamente. Por ejemplo, 35 se escribe pentatriaconta (o pentatriacontakis).

IR-2.14 LOCALIZADORES

IR-2.14.1 Introducción

Los localizadores se usan para indicar la posición de un sustituyente en, o de una característica estructural dentro de, una molécula progenitora. Éstos pueden ser números arábigos o letras.

IR-2.14.2 Números arábigos

Los números arábigos se usan como localizadores en los siguientes casos:

(a) Para numerar los átomos del esqueleto en los hidruros progenitores, para indicar: la localización de los átomos de hidrógeno donde haya números de enlaces inusuales, las insaturaciones y las posiciones de los átomos de hidrógeno puente en la estructura de un borano.

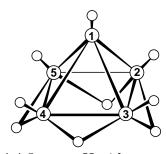
Ejemplos:

1.
$$123$$
 4 H_5SSSH_4SH $1\lambda^6, 3\lambda^6$ -tetrasulfano (no es $2\lambda^6, 4\lambda^6$)

2.
$$12 \quad 3 \quad 4 \quad 5$$

 $H_2NN=NHNNH_2$ pentaazeno

3.



2,3:2,5:3,4:4,5-tetra-μH-*nido*-pentaborano(9)

(b) En la nomenclatura de reemplazo

Ejemplo:

(c) En la nomenclatura de adición

Ejemplo:

(d) En la nomenclatura de Hantzsch-Widman (Sección IR-6.2.4.3), para indicar las posiciones de los átomos del esqueleto.

Ejemplo:

6.

1,3,2,4-dioxadiestibetano

(e) En la nomenclatura de Hantzsch-Widman (Sección IR-6.2.4.3), para designar el hidrógeno indicado

Ejemplo:

7.

1*H*-1,2,3-disilagermireno

(f) En la nomenclatura de sustitución, para especificar las posiciones de los grupos sustituyentes.

Ejemplo:

4,5-dicloropentasilano-1-ol

(g) En la nomenclatura de sustitución, para especificar el átomo del esqueleto sobre el que se ha llevado a cabo una operación de adición o sustracción.

Ejemplo:

(h) En los nombres de von Baeyer, para indicar la topología de un sistema de anillos policíclico.

Ejemplo:

10.

biciclo[4.4.0]decasilano

(i) En los compuestos de coordinación polinucleares, para numerar los átomos centrales (véase la Sección IR-9.2.5).

Ejemplo:

11. 1 2
$$[(OC)_5ReCo(CO)_4]$$
 nonacarbonil-1 κ^5C ,2 κ^4C -reniocobalto(Re — Co)

(j) Para indicar la estereoquímica de átomos particulares en las estructuras donde ya se han usado

números arábigos para especificar esos átomos.

Ejemplo:

IR-2.14.3 Letras localizadoras

Las letras cursivas mayúsculas se usan como localizadores en algunos nombres de sustitución. Véase, por ejemplo, la Sección IR-6.2.4.1.

Las letras cursivas minúsculas se usan en la nomenclatura de los polioxometalatos para designar los vértices de los poliedros de coordinación alrededor de los átomos centrales. Se unen al número del átomo central en el que se especifica un vértice particular. El tratamiento detallado se encuentra en el Capítulo II-1 de la referencia 2.

IR-2.15 PRINCIPIOS DE ORDENACIÓN

IR-2.15.1 Introducción

La nomenclatura química organiza los nombres de los elementos y de sus combinaciones. Mientras que escribir el símbolo o nombre de un elemento es inmediato, desde el momento en que un elemento se asocia con otro para formar, por ejemplo, un compuesto binario hay que hacer una elección del elemento que se escribe primero en la fórmula y en el nombre. El orden de citación en las fórmulas y en los nombres se basa en los principios descritos a continuación. Además, los grupos de átomos tales como iones, ligandos en los compuestos de coordinación y grupos sustituyentes en derivados de los hidruros progenitores se ordenan según reglas específicas.

IR-2.15.2 **Orden alfabético**

El orden alfabético se usa en las *fórmulas* como sigue:

(a) Dentro de cada uno de los grupos de cationes y de aniones en las fórmulas de las sales y las sales dobles. Se admiten excepciones a esta regla si se quiere dar una información estructural específica como en el ejemplo 5 siguiente.

Ejemplos:

- 1. BiClO (aniones Cl⁻ y O²⁻)
- 2. NaOCl (el anión es OCl⁻, véase la Sección IR-4.4.3.1)
- 3. $KNa_4Cl(SO_4)_2$
- 4. CaTiO₃ (tipo *perovskita*)
- 5 SrFeO₃ (tipo *perovskita*)
- (b) En las fórmulas de los compuestos de coordinación y de las especies tratadas formalmente como compuestos de coordinación, los ligandos se citan en orden alfabético de sus fórmulas o abreviaturas (compárese con la Sección IR-2.15.3.4). Donde haya esta posibilidad, el símbolo del átomo dador en las fórmulas de los ligandos debe colocarse el más próximo al átomo central al que

se coordina.

Ejemplo:

- 6. $[CrCl_2(NH_3)_2(OH_2)_2]$
- (c) En la construcción de la fórmula de un compuesto de adición formal, las fórmulas de los componentes individuales se ordenan en primer lugar por el número de cada uno de los componentes y después por orden alfabético. (Véase la Sección IR-4.4.3.5)

El orden alfabético se usa en los nombres como sigue:

(d) En los nombres de composición, se ordenan alfabéticamente los nombres de los componentes formalmente electropositivos y los de los formalmente electronegativos, y este último grupo de precede al primero.[#] Obsérvese que este orden de componentes puede diferir del orden de los correspondientes componentes en la fórmula, como en los ejemplos 7, 9 y 10.

Ejemplos:

7.	$KMgF_3$	fluoruro de m agnesio y p otasio
8.	BiClO	cloruro óxido de bismuto
9.	ZnI(OH)	hidróxido yoduro de cinc
10.	SrFeO ₃	trióxido de h ierro y e stroncio (compárese con el ejemplo 5 anterior)

(e) En la citación de los ligandos en los nombres de adición, se mantiene el orden alfabético de los nombres de los ligandos, independientemente del número de cada ligando y de si el compuesto es mononuclear o polinuclear (compárese con la Sección IR-2.15.3.4).

Ejemplos:

11. K[AuS(S₂)] (disulfuro)sulfuroaurato(1-) de potasio
 12. [CrCl₂(NH₃)₄]⁺ tetraamminodiclorocromo(1+)

Una regla similar se aplica para citar los nombres de los grupos sustituyentes en la nomenclatura de sustitución (véase la Sección IR-7.4.3).

(f) En la citación de los nombres de los átomos del esqueleto en la nomenclatura de adición de cadenas y ciclos (compárese con la Sección IR-7.4.3).

Ejemplo:

13. HOS(O)₂SeSH

1,4-dihidruro-2,2-dióxido-1-oxy-3-seleni-2,4-disulfi-[4]catena

(g) En la construcción del nombre de los compuestos de adición formales, los nombres de los componentes individuales se ordenan en primer lugar por el número de cada componente y después alfabéticamente (véase la Sección IR-7.4.3).

^{*} NT. En español no existe el genitivo sajón. Por ello, a la hora de nombrar los componentes, los electronegativos preceden a los electropositivos. Sin embargo, en las fórmulas se escriben en el orden inverso.

IR-2.15.3 Otras reglas de ordenación

IR-2.15.3.1 Orden de los elementos según la tabla periódica

Una importante secuencia de los elementos se basa en la Tabla Periódica y se muestra en la Tabla VI. Las columnas de los elementos —de la 1 a la 18— se conectan por flechas que conducen en una dirección comenzando desde los elementos menos metálicos y continúa hacia los elementos más metálicos. Solamente el hidrógeno tiene una posición única. Este orden tiene su origen en consideraciones de electronegatividad aunque el oxígeno se coloca ahora en su posición normal en el grupo 16. Se usa para ordenar los símbolos y los nombres de los elementos en las situaciones que se citan a continuación.

(a) En los nombres de composición de los compuestos binarios y de sus fórmulas correspondientes, el elemento que se encuentre el *último* al seguir la flecha en la Tabla VI se representa el *primero* tanto en las fórmulas como en los nombres.#

Ejemplos:

1.	S_2Cl_2	dicloruro de diazufre
2.	O ₂ Cl	cloruro de dioxígeno
3.	H_2Te	telururo de dihidrógeno
4	AlH ₂	trihidruro de aluminio

- (b) En los nombres de adición de los compuestos polinucleares, el átomo central que se encuentra el *último* al seguir la flecha se lista el primero; compárese con las Secciones IR-7.3.2 e IR-9.2.5.1.
- (c) En los nombres de adición de cadenas y ciclos, para determinar la numeración de los átomos del esqueleto si no estuviese completamente definida por la estructura del esqueleto. Al elemento que se encuentra el *primero* al seguir las flechas de la Tabla VI se le asigna el número *más bajo*. Obsérvese que los términos en 'i' de los elementos (Tabla X) se citan alfabéticamente.

Ejemplo:

5. HOS(O)₂SeSH

1,4-dihidruro-2,2-dióxido-1-oxi-3-seleni-2,4-disulfi-[4]catena

(d) En los nombres de Hantzsch-Widman, al elemento que se encuentra el *primero* al seguir las flechas de la Tabla VI se le asigna el número *más bajo*. Los términos en 'a' de los elementos (Tabla X) se citan en el mismo orden.

Ejemplos:

^{1,3,2,4-}oxatiadiestibetano 1,3,2,4-oxaselenadiestibetano

[#] NT. En español, las fórmulas se escriben en el mismo orden que en inglés, pero se nombran *primero* los componentes electronegativos en el orden establecido, separados por la preposición 'de', y seguidos de los componentes electropositivos en el orden indicado por la flecha.

(e) En los nombres en los que los heteroátomos que reemplazan a átomos del esqueleto se indican con prefijos 'a', al elemento que se encuentra el *primero* al seguir las flechas de la Tabla VI se le asigna el número *más bajo*. Los términos en 'a' de los elementos (Tabla X) se citan en el mismo orden.

Ejemplos:

1-oxa-3-tia-2,4-diestibaciclobutano

1-oxa-3-selena-2,4-diestibaciclobutano

IR-2.15.3.2 *Orden de los hidruros progenitores*

Cuando exista la posibilidad de elegir el hidruro progenitor entre los recogidos en la Tabla IR-6.1 (o los correspondientes hidruros con números de enlaces inusuales, compárese con la Sección IR-6.2.2.2), el nombre se basa en el hidruro progenitor del elemento que se encuentra en primer lugar en la secuencia:

$$N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al > Ga > In > Tl > O > S > Se > Te > C > F > Cl > Br > I.$$

En particular, esta regla se aplica para nombrar los compuestos organometálicos de los elementos de los grupos 13–16 cuando se tiene que elegir entre varios hidruros progenitores (Sección IR-10.3.4).

Ejemplo:

Obsérvese que, debido a las reglas de la nomenclatura de sustitución, lo anterior puede no entrar necesariamente en juego aunque haya en el compuesto dos o más elementos que aparecen en la secuencia. Por ejemplo, el nombre de sustitución de HTeOH es telanol, es decir, basado en telano y no en oxidano porque el grupo característico OH tiene que citarse como un sufijo.

IR-2.15.3.3 Orden de los grupos característicos en la nomenclatura de sustitución

El orden para la elección del grupo funcional principal está ya definido en la nomenclatura de sustitución (véase la Sección P-41 de la referencia 1).

IR-2.15.3.4 Orden de los ligandos en las fórmulas y en los nombres

Como regla general en las *fórmulas* de los compuestos de coordinación, las abreviaturas o las fórmulas que representan a los ligandos se citan en orden alfabético. Los ligandos puente se citan inmediatamente después de los ligandos terminales del mismo tipo, si hubiera alguno, y en orden creciente de la multiplicidad del puente. (Véanse también las Secciones IR-9.2.2 e IR-9.2.5.2)

En los *nombres* de los compuestos de coordinación, los nombres de los ligandos preceden al del átomo central y se citan en orden alfabético. Para cada tipo de ligando, los ligandos puente se citan antes que los ligandos terminales del mismo tipo, si lo hubiese, v.g., di-μ-cloruro-tetracloruro

y en orden decreciente de la multiplicidad del puente, por ejemplo, μ_3 -óxido-di- μ -trioxido..... (Véanse también las Secciones IR-9.2.2 e IR-9.2.5.1).

Ejemplo:

1. $[Cr_2(\mu\text{-O})(OH)_8(\mu\text{-OH})]^{5-}$ $\mu\text{-hidr}\acute{o}xido\text{-octahidr}\acute{o}xido\text{-}\mu\text{-}\acute{o}xido\text{-dicromato}(5-)$

De este modo, los ligandos terminales están más próximos al átomo central en las fórmulas y en los nombres y la multiplicidad de los ligandos puente aumenta al alejarse del metal.

IR-2.15.3.5 Orden de los componentes en las fórmulas y en los nombres de las sales

En las fórmulas de las sales, sales dobles y compuestos de coordinación, los cationes preceden a los aniones. En los nombres se citan al contrario, es decir, los nombres de los aniones preceden a los de los cationes. Dentro de cada uno de estos grupos el orden es el alfabético.

IR-2.15.5.6 Modificación isotópica

En los compuestos modificados isotópicamente, existe un principio de prioridad que gobierna el orden de citación de los símbolos de los nucleidos. (Véase la Sección II-2.2.5 de la referencia 2).

IR-2.15.5.7 Prioridades estereoquímicas

En la nomenclatura estereoquímica de los compuestos de coordinación, el procedimiento para asignar los números de prioridad a los átomos ligantes de un sistema de coordinación mononuclear se basa en la secuencia de reglas estándar diseñada para los compuestos de carbono quirales (las reglas de Cahn, Ingold y Prelog o reglas CIP, 6 véase la Sección IR-9.3.3.2).

IR-2.15.5.8 Orden jerárquico de los signos de puntuación

En los nombres de los compuestos de coordinación y de compuestos del boro, los signos de puntuación que se usan para separar los símbolos de los átomos de los localizadores numéricos, los localizadores que indican átomos puente y los otros tipos de localizadores que puedan encontrarse, se ordenan según la siguiente jerarquía:

Los dos puntos se usan solamente para los ligandos puente, de modo que una jerarquía general más restringida es simplemente: coma < punto y coma. La secuencia para especificar los ligandos puente es: coma < dos puntos. (Véanse el ejemplo 2 en la Sección IR-2.5.2 y la Sección IR-9.2.5.5).

IR-2.16 NOTAS FINALES

En este capítulo, se han recogido los diferentes usos de las letras, los números y los símbolos en los nombres y en las fórmulas bajo encabezamientos comunes para ofrecer una comprobación fácil que asegure que la fórmula o el nombre construidos concuerdan con la práctica admitida. Sin embargo, este capítulo no es suficiente para aclarar todas las reglas que se necesitan para construir un nombre o una fórmula y se aconseja al lector que consulte otros capítulos adecuados para un tratamiento más detallado.

IR-2.17 REFERENCIAS

- 1. Nomenclature of Organic Chemistry, IUPAC Recommendations, W. H. Powell y H. Favre (Eds.), Royal Society of Chemistry, en preparación: [véase también Nomenclature of Organic Chemistry, Pergamon Press, Oxford, 1979; A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds, Recommendations 1993, R. Panico, W. H. Powell y J. C. Richer (Eds.), Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1993, y las correcciones en Pure Appl. Chem., 71, 1327–1330 (1999)].
- 2. *Nomenclature of Inorganic Chemistry II, IUPAC Recommendations 2000*, J. A. McCleverty y N. G. Connelly (Eds.), Royal Society of Chemistry, 2001. (El *Libro Rojo II*)
- 3. *Compendium of Macromolecular Nomenclature*, W. V. Metanomski (Ed.), Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1991. (El *Libro Púrpura*. Se planifica la publicación de la segunda edición en 2005).
- 4. *Nomenclature of Inorganic Chemistry, IUPAC Recommendations 1990*, G. J. Leigh (Ed.), Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1990.
- 5. J. B. Casey, W. J. Evans, W. H. Powell, *Inorg. Chem.*, **20**, 1333–1341 (1981).
- 6. R.S. Cahn, C. Ingold, V. Prelog, *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.*, **5**, 385–415 (1966); V. Prelog, G. Helmchen, *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.*, **21**, 567–583 (1982).

IR-3 Los elementos

CONTENIDO

- IR-3.1 Nombres y símbolos de los átomos
 - IR-3.1.1 Nomenclatura sistemática y símbolos de los nuevos elementos
- IR-3.2 Indicación de la masa, la carga y el número atómico usando índices (subíndices y superíndices)
- IR-3.3 Isótopos
 - IR-3.3.1 Isótopos de un elemento
 - IR-3.3.2 Isótopos del hidrógeno
- IR-3.4 Elementos (o sustancias elementales)
 - IR-3.4.1 Nombre de un elemento de estructura o formula molecular indefinida
 - IR-3.4.2 Alótropos (modificaciones alotrópicas) de los elementos
 - IR-3.4.3 Nombres de los alótropos de fórmula molecular definida
 - IR-3.4.4 Modificaciones alotrópicas cristalinas de un elemento
 - IR-3.5.5 Modificaciones sólidas amorfas y alótropos comúnmente admitidos como de estructura indefinida
- IR-3.5 Los elementos en la tabla periódica
- IR-3.6 Referencias

IR-3.1 NOMBRES Y SÍMBOLOS DE LOS ÁTOMOS

Los orígenes de los nombres de algunos elementos químicos, como el antimonio, se pierden en la antigüedad. Otros elementos identificados (o descubiertos) durante los tres últimos siglos se nombraron atendiendo a varias asociaciones relacionadas con su origen, propiedades físicas o químicas, etc., y, más recientemente, en memoria de los nombres de algunos científicos eminentes.

En el pasado reciente, algunos elementos tenían dos nombres porque dos grupos diferentes habían reivindicado su descubrimiento. Para evitar este tipo de confusión, en 1947 se decidió que, una vez comprobada la existencia de un elemento más allá de la duda razonable, los descubridores tenían el derecho de *sugerir* un nombre a la IUPAC, pero que solamente la Comisión de Nomenclatura de Química Inorgánica (CINC) podía hacer una recomendación al Consejo de la IUPAC, quien tomaría la decisión final.

Con el actual procedimiento, ¹ las reivindicaciones del descubrimiento de un nuevo elemento se investigan primero por un comité conjunto IUPAC-IUPAP (Unión Internacional de Física Pura y Aplicada), el cual asigna la prioridad consecuentemente. Después, se invita a los descubridores reconocidos a sugerir un nombre a la División de Química Inorgánica, la cual hace más tarde una recomendación formal al Consejo de la IUPAC. Debe recalcarse que el nombre de cualquier elemento nuevo que resulta del proceso anterior, una vez aprobado por el Consejo, no tiene implicación alguna sobre la prioridad del descubrimiento. Lo mismo se entiende que se aplica a los nombres aprobados por la IUPAC en el pasado, cualquiera que sea su historia previa.

Los nombres de los átomos de números atómicos 1 al 111 aprobados por la IUPAC para su uso en lengua española, se encuentran recogidos por orden alfabético en la Tabla 1.* Es muy deseable que los nombres utilizados en los diferentes idiomas se parezcan al máximo a sus nombres en inglés, pero se admite que existen a menudo nombres diferentes y muy establecidos en otros idiomas para elementos a los que se les dio nombre en el pasado. En las notas al pie de la Tabla I, se citan algunos nombres que no se usan en la actualidad, pero que proporcionan la base de su símbolo atómico o de algunos afijos usados en la nomenclatura.

En las fórmulas químicas, cada átomo se representa por un único símbolo como se muestra en la Tabla I. Además, los símbolos D y T pueden usarse para los isótopos del hidrógeno con números de masa 2 y 3, respectivamente (véase la Sección IR-3.3.2).

IR-3.1.1 Nomenclatura sistemática y símbolos de los nuevos elementos

Los elementos recién descubiertos pueden ser citados en la literatura científica, pero se requieren descriptores temporales mientras no hayan recibido los nombres y símbolos permanentes de la IUPAC. Estos elementos pueden referenciarse por sus números atómicos, por ejemplo como 'elemento 120', pero la IUPAC ha aprobado una nomenclatura sistemática y una serie de símbolos de tres letras para ellos (véase la Tabla II).²

El nombre se obtiene directamente del número atómico del elemento usando las siguientes raíces numéricas:

0 = nil	3 = tri	6 = hex	$9 = enn^{\#}$
1 = un	4 = quad	7 = sept	
2 = bi	5 = pent	8 = oct	

Para construir el nombre, se unen las raíces en el orden de los dígitos que forman en número atómico y se les añade la terminación 'io'. La 'n' final de 'enn' se elimina cuando se encuentra antes de 'nil', así como la 'i' final de 'bi' y de 'tri' cuando aparece antes de 'io'.

El símbolo del elemento se compone con las letras iniciales de las raíces numéricas que forman el nombre.

Ejemplo:

1. 113 = ununtrio, símbolo Uut

IR-3.2 INDICACIÓN DE LA MASA, LA CARGA Y EL NÚMERO ATÓMICO USANDO ÍNDICES (SUBÍNDICES Y SUPERÍNDICES)

La masa, la carga y el número atómico de un nucleido se indican por medio de tres índices (subíndices y superíndices) colocados alrededor del símbolo. Las posiciones se ocupan como sigue:

índice superior izquierdonúmero de masa (o número másico)índice inferior izquierdonúmero atómicoíndice superior derechocarga iónica

Una carga colocada sobre un átomo de símbolo A se indica por A^{n+} o A^{n-} . No son válidas las notaciones A^{+n} ni A^{-n}

La posición inferior derecha de un símbolo atómico se reserva para un índice (subíndice)

* NT. En español, se puede eliminar la segunda ene, con lo que, sin excepción: 9 = en.

^{*} Las tablas numeradas con números romanos se encuentran juntas al final del libro.

que indica el número de estos átomos en una fórmula. Por ejemplo, S_8 es la fórmula de una molécula que contiene ocho átomos de azufre (véase la Sección IR-3.4). Para formalismos detallados, cuando se muestren también estados de oxidación o cargas, véase la Sección IR-4.6.1.

Ejemplo:

1. ${}^{32}_{16}S^{2+}$ representa un átomo de azufre doblemente ionizado de número atómico 16 y número de masa 32.

La reacción nuclear entre núcleos de $^{26}_{12}$ Mg y $^{4}_{2}$ He para dar núcleos de $^{29}_{13}$ Al y $^{1}_{1}$ H se escribe como sigue:³

26
Mg(α ,p) 29 Al

Para el uso de los símbolos atómicos que indican modificaciones isotópicas en las fórmulas químicas y la nomenclatura de los compuestos modificados isotópicamente, véanse la Sección IR-4.5 y el Capítulo II-2 de la referencia 4.

IR-3.3 ISÓTOPOS

IR-3.3.1 **Isótopos de un elemento**

Todos los isótopos de un elemento llevan el mismo nombre (pero véase la excepción en la Sección IR-3.3.2) y se designan por sus números de masa (véase la Sección IR-3.2). Por ejemplo, el átomo de número atómico 8 y número de masa 18 se llama oxígeno-18 y tiene el símbolo ¹⁸O.

IR-3.3.2 Isótopos del hidrógeno

El hidrógeno es una excepción a la regla de la Sección IR-3.3.1, ya que los tres isótopos ¹H, ²H y ³H pueden tener los nombres alternativos protio, deuterio y tritio, respectivamente. Los símbolos D y T pueden usarse para el deuterio y tritio, pero se prefieren ²H y ³H porque D y T pueden alterar la ordenación alfabética en las fórmulas (véase el Capítulo IR-4.5). Además, la combinación de un muón y un electrón se comporta como un isótopo ligero del hidrógeno. Se le llama muonio y su símbolo es Mu.⁵

Estos nombres dan lugar a los nombres de los cationes protón deuterón, tritón y muón para ${}^{1}H^{+}$, ${}^{2}H^{+}$, ${}^{3}H^{+}$ y Mu^{+} , respectivamente. Puesto que el nombre protón se usa a menudo en sentidos contradictorios, es decir, para los iones ${}^{1}H^{+}$ isotópicamente puros, por una parte, y para la mezcla isotópica natural indiferenciada, por otra, se recomienda que la mezcla isotópica natural se designe en general por el nombre hidrón, que deriva de hidrógeno.

IR-3.4 ELEMENTOS (O SUSTANCIAS ELEMENTALES)

IR-3.4.1 Nombre de un elemento de estructura o fórmula molecular indefinida

Una muestra de un elemento que tiene una fórmula indefinida o es una mezcla de alótropos (véanse las Secciones desde IR-3.4.2 a IR-3.4.5) tiene el mismo nombre que el átomo.

IR-3.4.2 Alótropos (modificaciones alotrópicas) de los elementos

Las modificaciones alotrópicas de un elemento tienen el nombre del átomo del que derivan, junto con un descriptor que especifica la modificación. Los descriptores comunes son letras griegas (α , β ,

 γ , etc.), colores y, en los casos adecuados, nombres de minerales (v.g., grafito y diamante para las dos formas más conocidas del carbono). Dichos nombres deben tomarse como provisionales, cuyo uso está limitado hasta que se establezca su estructura; una vez conocida ésta, se recomienda un sistema racional basado en la fórmula molecular (véase la Sección IR-3.4.3) o en la estructura cristalina (véase la Sección IR-3.4.4).

Los nombres comunes continuarán usándose para las modificaciones amorfas de un elemento y para aquellas que son mezclas de estructuras estrechamente relacionadas en las variedades comunes de su estado natural (como el grafito) o tienen una estructura desordenada y mal definida (como el fósforo rojo) (véase la Sección IR-3.4.5).

IR-3.4.3 Nombres de los alótropos de fórmula molecular definida

Los nombres sistemáticos se basan en el número de átomos que contiene la molécula, que se indica por un prefijo multiplicador de la Tabla IV. El prefijo 'mono' se usa únicamente cuando el elemento no se presenta en la naturaleza en estado monoatómico. Si el número es grande y desconocido, como sucede en las cadenas largas y anillos grandes, puede usarse el prefijo 'poli'. Cuando sea necesario, se pueden utilizar los prefijos adecuados de la Tabla V para indicar su estructura. Cuando se desea especificar una variedad polimórfica particular de un elemento con estructura definida, como S_8 en las formas α , β , o γ del azufre, debe usarse el método de la Sección IR-3.4.4 (véanse los ejemplos 13–15 de la Sección IR-3.4.4).

Ejemplos:

Fórmula	Nombre sistemático	Nombre alternativo aceptable
Ar	argón	
Н	monohidrógeno	
N	mononitrógeno	
N_2	dinitrógeno	
N_3	trinitrógeno(●)	
O_2	dioxígeno	oxígeno
O_3	trioxígeno	ozono
P_4	tetrafósforo	fósforo blanco
S_6 ,	hexaazufre	ε-azufre
S_8	ciclo-octaazufre	α -azufre, β -azufre-, γ -azufre
S_n	poliazufre	μ-azufre (o azufre plástico)
C ₆₀	hexacontacarbono	[60]fullereno
	Ar H N N_2 N_3 O_2 O_3 P_4 S_6 , S_8 S_n	Ar argón H monohidrógeno N mononitrógeno N_2 dinitrógeno N_3^{\bullet} trinitrógeno(\bullet) O_2 dioxígeno O_3 trioxígeno O_4 tetrafósforo O_4 tetrafósforo O_5 hexaazufre O_6 hexaazufre O_7 poliazufre

En el ejemplo 12, el nombre [60] fullereno debe tomarse como un nombre aceptable no-sistemático para una estructura particular de C₆₀. Para más detalles, véase la Sección P-27 de la referencia 6.

IR-3.4.4 Modificaciones alotrópicas cristalinas de un elemento

Las modificaciones alotrópicas cristalinas son polimorfos de los elementos. Cada una de ellas puede nombrarse añadiendo el símbolo de Pearson⁷ (véase la Sección IR-11.5.2) encerrado entre paréntesis al final del nombre del átomo. Este símbolo define la estructura del alótropo en términos

de su red de Bravais (clase cristalina y tipo de la celda unidad, véase la Tabla IR-3.1) y el número de átomos en la celda unidad. Por ejemplo, hierro(cF4) es la modificación alotrópica del hierro (γ -hierro) con una red cúbica (c) centrada en las caras (F) que contiene cuatro átomos en la celda unidad.

Tabla IR.3.1 Símbolos de Pearson usados para las catorce redes de Bravais

Sistema	Símbolo de redª	Símbolo de Pearson
Triclínico	P	aP
Monoclínico	P	mP
	S^{b}	mS
Ortorrómbico [#]	P	oP
	S	oS
	F	oF
	I	oI
Tetragonal	P	tP
	I	tI
Hexagonal (y trigonal P)	P	hP
Romboédrico	R	hR
Cúbico	P	cP
	F	cF
	I	cI

^a P, S, F, I y R son redes primitiva, centrada en las caras opuestas, centrada en las caras, centrada en el cuerpo y romboédrica, respectivamente. Antes, se utilizaba la letra C en lugar de la S.

Ejemplos:

Símbolo Nombre sistemático Nombre común P_n 1. fósforo(oS8) fósforo negro 2. C_n carbono(cF8)diamante 3. C_n carbono(hP4)grafito (forma común) 4. C_n carbono(*hR*6) grafito (forma menos común) 5. α-hierro Fe, hierro(cI2) Fe_n 6. hierro(cF4)γ-hierro 7. Sn_n esta $\tilde{n}o(cF8)$ α-estaño o estaño gris 8. β-estaño o estaño blanco Sn_n esta $\tilde{n}o(tI4)$ 9. Mn_n manganeso(*cI*58) α-manganeso 10. manganeso(cP20) Mn_n β-manganeso 11. Mn_n manganeso(cF4) γ-manganeso 12. Mn_n manganeso(*cI*2) δ-manganeso 13. S_8 azufre(oF128)α-azufre

_

^b Segunda elección de red, con eje y único.

[#] NT. Este sistema se conoce en español como rómbico. Sin embargo, se ha traducido por ortorrómbico para respetar los símbolos internacionales de Pearson.

14.	S_8	azufre(mP48)	β-azufre
15.	S_8	azufre(mP32)	γ-azufre

En varios casos, el símbolo de Pearson es incapaz de distinguir entre dos alótropos cristalinos de un elemento. En dicha circunstancia, se añade el grupo espacial dentro del paréntesis. Es esto todavía fuera insuficiente para distinguir los alótropos, tendrán que citarse los parámetros de red de características diferentes. Alternativamente, puede ser también útil una notación que implique el tipo de compuesto (véanse la Sección IR-4.2.5 y el Capítulo IR-11).

IR-3.4.5 Modificaciones sólidas amorfas y alótropos comúnmente admitidos como de estructura indefinida

Estos se distinguen por los descriptores habituales, tales como una letra griega, por los nombres basados en propiedades físicas o con nombres de minerales.

Ejemplos:

1.	C_n	carbono vítreo
2.	C_n	carbono grafítico (carbono en forma de grafito con independencia de los defectos estructurales)
3.	P_n	fósforo rojo [una estructura desordenada que contiene partes de fósforo($oC8$) y partes de tetrafósforo]
4.	As_n	arsénico amorfo

IR-3.5 ELEMENTOS EN LA TABLA PERIÓDICA

Los grupos de elementos de la tabla periódica se numeran del 1 al 18 (véase las páginas interiores después de la portada). Los elementos de los grupos 1, 2 y 13–18 (exceptuando al hidrógeno) se denominan elementos de los grupos principales y, excepto en el grupo 18, los dos primeros elementos de un grupo principal se llaman elementos típicos. Opcionalmente, pueden usarse las letras s, p, d, y f para distinguir los diferentes bloques de elementos. Por ejemplo, los elementos de los grupos 3–12 son los elementos del bloque d. Estos elementos también se conocen generalmente como los elementos de transición, aunque los elementos del grupo 12 no siempre están incluidos; los elementos del grupo f, a veces, se denominan elementos de transición interna. Si fuera conveniente para una finalidad particular, los diferentes grupos se pueden nombrar con el primer elemento de cada uno de ellos; por ejemplo, los elementos del grupo del boro (B, Al, Ga, In, Tl), los elementos del grupo del titanio (Ti, Zr, Hf, Rf), etc.

Los siguientes nombres colectivos de grupos de átomos afines están aprobados por la IUPAC: metales alcalinos (Li, Na, K, Rb, Cs, Fr), metales alcalinotérreos (Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Ra), pnictógenos (N, P, As, Sb, Bi), calcógenos (O, S, Se, Te, Po), halógenos (F, Cl, Br, I, At), gases nobles (He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn), lantánidos o lantanoides (La, Ce, Pr, Nd, Pm, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu), metales de las tierras raras (Sc, Y y los lantánidos) y actínidos o actinoides (Ac, Th, Pa, U, Np, Pu, Am, Cm, Bk, Cf, Es, Fm, Md, No, Lr).*

Los términos genéricos pnicturo, calcogenuro y halogenuro (o haluro) se usan para nombrar

-

[#] NT. Por ejemplo, las dos formas de Se, α-selenio y β-selenio, ambas Se_n, se distinguen por sus respectivos símbolos (mP32, P21/n) y (mP32, P21/a).

^{*} NT. En inglés, aparecen exclusivamente los nombres *lanthanoids* y *actinoids*. Sin embargo, en español es frecuente el uso de los nombres lantánidos y actínidos, respectivamente, en lugar de lantanoides y actinoides.

compuestos de los pnictógenos, calcógenos y halógenos.

Aunque lantanoide significa 'similar al lantano' y, por tanto, el lantano no debería incluirse, el uso corriente hace que, de hecho, lo esté. Lo mismo sucede con el término actinoide. La terminación inglesa '-*ide*' indica normalmente un ion negativo, por lo tanto, las palabras lantanoide y actinoide son preferidas en ese idioma a lantánido y actínido.

IR-3.6 REFERENCIAS

- 1. Naming the New Elements, W. H. Koppenol, *Pure Appl. Chem.*, **74**, 787–791 (2002).
- 2. Recommendations for the Naming of Elements of Atomic Numbers Greater Than 100, J. Chatt, *Pure Appl. Chem.*, **51**, 381–384 (1979)
- 3. *Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry,* 2ª Ed., I. Mills, T. Cvitas, K. Homann, N. Kallay y K. Kuchitsu (Eds.), Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1993. (El *Libro Verde*. La tercera edición se encuentra en fase de preparación).
- 4. *Nomenclature of Inorganic Chemistry II, IUPAC Recommendations 2000*, J. A. McCleverty y N. G. Connelly (Eds.), Royal Society of Chemistry, 2001. (El *Libro Rojo II*).
- 5. Names for Muonium and Hydrogen Atoms and Their Ions, W. H. Koppenol, *Pure Appl. Chem.*, **73**, 377–379 (2001).
- 6. *Nomenclature of Organic Chemistry IUPAC Recommendations*, W. H. Powell y H. Favre (Eds.), Royal Society of Chemistry, en preparación.
- 7. W. B. Pearson, A Handbook of Lattice Spacings and Structures of Metals and Alloys, Vol. 2, Pergamon Press, Oxford, 1967, páginas 1, 2. Para tablas de parámetros de red y datos de los elementos metálicos y semimetales, véanse las páginas 79–91. Véase también P. Villars y L. D. Calvert, Pearson's Handbook of Crystallographic Data for Intermetallic Phases, Vols. 1–3, American Society for Metals, Metals Park, Ohio, USA, 1985.
- 8. También se usa el nombre alternativo de 'pnicógeno'.

IR-4 Fórmulas

CONTENIDO

R-4.1 Introducción			
IR-4.2 Definiciones de los tipos de fórmulas			
IR-4.2.1 Fórmulas empíricas			
IR-4.2.2 Fórmulas moleculares			
IR-4.2.3 Fórmulas estructurales y el uso de los signos de inclusión en las fórmulas			
IR-4.2.4 Fórmulas de los compuestos de adición (formales)			
IR-4.2.5 Información estructural del estado sólido			
IR-4.3 Indicación de la carga iónica			
IR-4.4 Secuencia de citación de los símbolos en las fórmulas			
IR-4.4.1 Introducción			
IR-4.4.2 Principios de ordenación			
IR-4.4.2.1 Electronegatividad			
IR-4.4.2.2 Orden alfanumérico			
IR-4.4.3 Fórmulas de clases específicas de compuestos			
IR-4.4.3.1 Especies binarias			
IR-4.4.3.2 Tratamiento formal como compuestos de coordinación			
IR-4.4.3.3 Compuestos en cadena			
IR-4.4.3.4 Fórmulas de sales generalizadas			
IR-4.4.3.5 Compuestos de adición (formales)			
IR-4.4.4 Abreviaturas de los ligandos			
IR-4.5 Compuestos modificados isotópicamente			
IR-4.5.1 Formalismo general			
IR-4.5.2 Compuestos sustituidos isotópicamente			
IR-4.5.3 Compuestos marcados isotópicamente			
IR-4.5.3.1 Tipos de marcado			
IR-4.5.3.2 Compuestos marcados específicamente			
IR-4.5.3.3 Compuestos marcados selectivamente			
IR-4.6 Modificadores opcionales de las fórmulas			
IR-4.6.1 Estado de oxidación			
IR-4.6.2 Fórmulas de los radicales			
IR-4.6.3 Fórmulas de los compuestos ópticamente activos			
IR-4.6.4 Indicación de los estados excitados			
IR-4.6.5 Descriptores estructurales			
IR-4.7 Referencias			

IR-4.1 INTRODUCCIÓN

Las fórmulas (empíricas, moleculares y estructurales, como se describen a continuación) proporcionan un método simple y claro para identificar los compuestos. Tienen una importancia fundamental en las ecuaciones químicas y en las descripciones de los procedimientos químicos. Su normalización es muy recomendable para evitar ambigüedades y para muchos otros fines, por ejemplo, su uso en bases de datos, directorios informáticos de documentación, etc.

IR-4.2 DEFINICIONES DE LOS TIPOS DE FÓRMULAS

IR-4.2.1 **Fórmulas empíricas**

La fórmula empírica de un compuesto está formada por la yuxtaposición de los símbolos atómicos con los subíndices enteros adecuados que proporcionan la fórmula más sencilla posible que expresa su composición. El orden de citación de los símbolos en las fórmulas se indica en la Sección IR-4.4, pero *a falta de cualquier otro criterio de ordenación* (por ejemplo, si la información estructural disponible es escasa), en una fórmula empírica debe usarse el orden alfabético de los símbolos atómicos, excepto para los compuestos que contienen carbono, donde C e H se citan, respectivamente, el primero y el segundo de forma habitual.¹

Ejemplos:

- 1. BrClH₃N₂NaO₂Pt
- 2. $C_{10}H_{10}ClFe$

IR-4.2.2 **Fórmulas moleculares**

En los compuestos constituidos por moléculas discretas, la *fórmula molecular* puede usarse para indicar la composición real de las moléculas, en contraposición con la fórmula empírica. Para conocer el orden de citación de los símbolos en las fórmulas moleculares, véase la Sección IR-4.4.

La elección de la fórmula depende del contexto químico. En algunos casos, la fórmula empírica puede corresponder también a una composición molecular, en cuyo caso la única diferencia posible entre las dos fórmulas es la ordenación de los símbolos atómicos. Cuando no sea deseable o posible especificar la composición, como en el caso de los polímeros, puede usarse un subíndice alfabético, como n.

Ejemplos:

	Fórmula molecular	Fórmula empírica
1.	S_8	S
2.	S_n	S
3.	SF_6	F_6S
4.	S_2Cl_2	CIS
5.	$H_4P_2O_6$	H_2O_3P
6	Hg_2Cl_2	ClHg
7.	N_2O_4	NO_2

IR-4.2.3 Fórmulas estructurales y el uso de los signos de inclusión en las fórmulas

Una fórmula estructural da una información parcial o completa de la forma en que los átomos de una molécula están unidos y dispuestos en el espacio. En los casos más sencillos, una fórmula en línea, que es solamente una secuencia de símbolos atómicos, proporciona información estructural en el supuesto de que el lector sepa que la fórmula representa el orden de los átomos en la estructura lineal.

Ejemplos:

- 1. HOCN (fórmula empírica CHNO)
- 2. HNCO (fórmula empírica CHNO también)
- 3. HOOH (fórmula empírica HO)

Si el compuesto presenta una estructura ligeramente más complicada, se hace necesario el uso de signos de inclusión en las fórmulas en línea para separar subgrupos de átomos. Para evitar ambigüedades, se deben usar diferentes signos de inclusión para las unidades repetitivas y para las cadenas laterales.

Las reglas básicas para colocar signos de inclusión en las fórmulas estructurales son las siguientes:

- (i) Las unidades que se repiten en los compuestos en cadena se encierran entre corchetes.
- (ii) Los grupos laterales de una cadena principal y los grupos (ligandos) unidos a un átomo central se encierran entre paréntesis (excepto los átomos aislados cuando no exista ambigüedad con respecto a su conexión en la estructura, como el hidrógeno en hidruros con estructura en cadena).
- (iii) Una fórmula o parte de una fórmula que representa una entidad molecular puede colocarse entre signos de inclusión. Si se encierra la fórmula completa, deben utilizarse los corchetes, excepto si se aplica la regla (v).
- (iv) Una parte de una fórmula que va multiplicada por un subíndice también puede colocarse entre paréntesis o llaves, excepto si se trata de unidades repetitivas en compuestos en cadena; compárese con la regla (i).
- (v) En el caso de polímeros, si se pretende mostrar los enlaces entre las unidades repetitivas, la unidad repetitiva se encierra entre paréntesis tachados con el guión que representa el enlace superpuesto a los paréntesis. Si esto fuese difícil tipográficamente, los guiones pueden colocarse antes y después del paréntesis.
- (vi) Dentro de los corchetes, los signos de inclusión se colocan en el siguiente orden:

```
(), \{()\}, (\{()\}), \{(\{()\})\}, \text{ etc.}
```

(vii) Los átomos o grupos de átomos que se representan junto con un prefijo simbólico, por ejemplo un modificador estructural tal como 'μ', se escriben entre signos de inclusión utilizando el orden de alojamiento de apartado (vi).

El uso de signos de inclusión para especificar la sustitución isotópica se describe en la Sección IR-4.5.

Comparadas con las fórmulas en línea, las fórmulas desarrolladas (como los ejemplos 12 y 13 siguientes) dan una información mayor o completa sobre la estructura.

(Las reglas necesarias para ordenar los símbolos en algunas de las fórmulas dadas como ejemplos a continuación, se encuentran en la Sección IR-4.4.3).

Ejemplos:

4. SiH₃[SiH₂]₈SiH₃ [regla (i)] SiH₃[SiH₂]₅SiH(SiH₃)SiH₂SiH₃ [reglas (i) y (ii)] $Ca_3(PO_4)_2$ [regla (iv)] 7. $[Co(NH_3)_6](SO_4)_3$ [reglas (iii), (iv), (vi)] $[\{Rh(\mu-Cl)(CO)_2\}_2]$ [reglas (i), (iv), (vii)] 9. $K[Os(N)_3]$ [reglas (ii), (iii)] [regla (v)] 10 $(S)_n$ 11. $(HBO_2)_n$, o $(B(OH)O)_n$ [reglas (ii) y (v)] 12. 13.

14. NaCl

15. [NaCl]

La primera fórmula en el ejemplo 11 puede considerarse que es la fórmula molecular (Sección IR-4.2.2) que no contiene implicaciones sobre la estructura del polímero en cuestión. En los ejemplos 14 y 15, la fórmula [NaCl] puede usarse para distinguir el compuesto molecular formado por un átomo de sodio y un átomo de cloro del sólido de composición NaCl.

IR-4.2.4 Fórmulas de los compuestos de adición (formales)

En las fórmulas de los compuestos de adición y de los compuestos que pueden considerarse formalmente como tales, lo que incluye a los clatratos y las sales múltiples, se usa un formato especial. Las proporciones de los constituyentes se indican por números arábigos que preceden a la fórmula de los constituyentes y éstas se separan por un punto central. Las reglas para ordenar las fórmulas de los constituyentes de las fórmulas se describen en la Sección IR-4.4.3.5.

Ejemplos:

- 1. Na₂CO₃·10H₂O
- 2. 8H₂S·46H₂O
- 3. BMe₃·NH₃

IR-4.2.5 Información estructural del estado sólido

También puede darse información estructural si se indica el tipo de estructura como una nota de una fórmula. Por ejemplo, se pueden identificar los polimorfos añadiendo una expresión abreviada del sistema cristalino entre paréntesis (véanse las Secciones IR-11.5.2 e IR-11.7.2 y la Tabla IR-3.1). Las estructuras pueden identificarse también añadiendo el nombre de un compuesto tipo en cursiva y entre paréntesis, pero este uso puede ser ambiguo. Así, hay por lo menos diez variedades de ZnS(h). Cuando existen varios polimorfos que cristalizan en el mismo sistema, pueden diferenciarse por sus símbolos de Pearson (véanse las Secciones IR-3.5.3 e IR-11.5.2). Con frecuencia se utilizan letras griegas para designar los polimorfos, pero a menudo este uso es confuso y contradictorio y, por tanto, no se recomienda en general.

Ejemplos:

- 1. $TiO_2(t)$ (tipo anatasa)
- 2. $TiO_2(t)$ (tipo rutilo)
- 3. AuCd(c), o AuCd (tipo CsCl)

Para las fórmulas de disoluciones sólidas y de fases no-estequiométricas, véase el Capítulo IR-11.

IR-4.3 INDICACIÓN DE LA CARGA IÓNICA

La carga iónica se indica por medio de un superíndice superior derecho, en la forma A^{n+} o A^{n-} (no como A^{+n} ni A^{-n}). Si se escribe la fórmula entre signos de inclusión, el índice superior derecho se coloca fuera de ellos. Cuando los iones sean polímeros, la carga de una sola unidad repetitiva debe colocarse dentro del paréntesis que incluye la estructura polimérica o bien, la carga total de la especie polimérica debe colocarse fuera de los paréntesis del polímero. (Las reglas necesarias para ordenar los símbolos en algunas de las fórmulas de los ejemplos que siguen, se dan en la Sección IR-4.4.3).

Ejemplos:

- 1. Cu⁺
- 2. Cu²⁺
- 3. NO⁺
- 4. $[Al(H_2O)_6]^{3+}$
- 5. $H_2NO_3^+$
- 6. [PCl₄]⁺
- 7. As^{3-}
- $8 ext{ HF}^{2-}$
- 9 CN
- $10 S_2 O_7^{2-}$
- 11. $[Fe(CN)_6]^{4-}$
- 12. $[PW_{12}O_{40}]^{3-}$

13. [P₃O₁₀]⁵⁻, o [O₃POP(O)₂OPO₃]⁵⁻, o

14. $([CuCl_3]^-)_n$, o $([CuCl_3])_n^{n-}$, o

IR-4.4 SECUENCIA DE CITACIÓN DE LOS SÍMBOLOS EN LAS FÓRMULAS

IR-4.4.1 **Introducción**

Los símbolos atómicos en las fórmulas pueden ordenarse de varios modos. En la Sección IR-4.4.3 se describen los convenios adoptados generalmente para algunas clases de compuestos importantes. Como un prerrequisito, en la Sección IR-4.4.2 se explica cual es el significado de los dos principios de ordenación: la 'electronegatividad' y el 'orden alfanumérico'.

IR-4.4.2 **Principios de ordenación**

IR-4.4.2.1 Electronegatividad

Si se toma la electronegatividad como el principio de ordenación en una fórmula o de una parte de una fórmula, los símbolos se citan según las electronegatividades relativas, de manera que se coloca primero el elemento menos electronegativo. Con este fin, se usa la Tabla VI* como una guía. Por convenio, un elemento es tanto más electropositivo cuanto más próximo al final aparece el elemento en la tabla al recorrerla por completo en el sentido que indican las flechas.

IR-4.4.2.2 Orden alfanumérico

Los símbolos atómicos en las fórmulas en línea se ordenan alfabéticamente. Los símbolos de una sola letra anteceden siempre a los de dos letras con la misma letra inicial, v.g., B va antes que Be. Los símbolos de dos letras se ordenan alfabéticamente entre ellos, v.g., Ba precede a Be.

Las fórmulas en línea de especies diferentes pueden ordenarse alfanuméricamente, v.g., en los índices y registros o listados, según el orden de los símbolos atómicos y de sus subíndices, v.g.: $B < BH < BO < B_2O_3$. El grupo NH_4 se considera a menudo como un símbolo único y, consecuentemente, se coloca detrás del Na, por ejemplo.

A modo de ejemplo, el orden de citación de algunas entidades que contienen nitrógeno y sodio es:

$$N^{3-}$$
, NH_2^- , NH_3 , NO_2^- , NO_2^{2-} , NO_3^- , $N_2O_2^{2-}$, N_3^- , Na , $NaCl$, NH_4Cl

Esta ordenación puede aplicarse a las fórmulas completas en índices y registros etc. y puede usarse también para ordenar las partes de una determinada fórmula, a veces con referencia al principio de

^{*} Las Tablas numeradas con números romanos se encuentran juntas al final de este libro.

ordenación de la Sección IR-4.4.2.1, como se describe a continuación para diferentes clases específicas de compuestos e iones.

IR-4.4.3 Fórmulas de clases específicas de compuestos

IR-4.4.3.1 Especies binarias

De acuerdo con la práctica tradicional, para las especies binarias se usa generalmente el criterio de la electronegatividad.²

Ejemplos:

- 1. NH₃
- $2. H_2S$
- 3. OF₂
- 4. O₂Cl
- 5. ClO⁻
- 6. PH₄⁺
- 7. P₂O₇⁴⁻
- 8. $[SiAs_4]^{8-}$
- 9. RbBr
- 10. $[Re_2Cl_9]^-$
- 11 HO⁻ u OH⁻
- 12. Rb₁₅Hg₁₆
- 13. Cu₅Zn₈ y Cu₅Cd₈

Obsérvese que la fórmula del ion hidróxido debería ser HO para ser coherente con el convenio anterior.

La ordenación por electronegatividad podría aplicarse, en principio, a especies ternarias, cuaternarias, etc. Sin embargo, para la mayor parte de los compuestos que están formados por más de dos elementos se usan más a menudo otros criterios de ordenación de los símbolos de los elementos en las fórmulas (véanse las Secciones desde IR-4.4.3.2 hasta IR-4.4.3.4)

IR-4.4.3.2 Tratamiento formal como compuestos de coordinación

La nomenclatura de los compuestos de coordinación se describe con detalle en el Capítulo IR-9. Aquí se ofrece solamente un breve resumen de la construcción de las *fórmulas* de los compuestos de coordinación. Con la finalidad de construir sus fórmulas, muchos compuestos poliatómicos pueden ser tratados adecuadamente como si fuesen compuestos de coordinación

En la fórmula de una entidad de coordinación, el símbolo del átomo central (o de los átomos centrales) se coloca(n) en primer lugar, y le siguen los símbolos o fórmulas de los ligandos, salvo que al cambiar el orden pueda darse una información estructural adicional (véase, por ejemplo, la Sección IR-4.4.3.3).

El orden de citación de los átomos centrales se basa en la electronegatividad, como se describió en la Sección IR-4.4.2.1. Los ligandos se citan por orden alfabético (Sección IR-4.4.2.2) según el primer símbolo de la fórmula del ligando o de la abreviatura del ligando tal como se escribe (Sección IR-4.4.2.2). Cuando sea posible, debe escribirse la fórmula del ligando de manera que el átomo dador esté lo más próximo posible al átomo central al que está unido.

La entidad de coordinación completa, lleve o no carga, puede encerrarse entre corchetes. La práctica habitual es usar permanentemente corchetes para las entidades de coordinación que tienen un metal de transición como átomo central (véanse las Secciones IR-2.2.2 e IR-9.2.3.2).

Ejemplos:

- 1. PBrCl₂
- 2. SbCl₂F o [SbCl₂F]
- 3. $[Mo_6O_{18}]^{2-}$
- 4. [CuSb₂]⁵⁻
- 5. $[UO_2]^{2+}$
- 6. $[SiW_{12}O_{40}]^{4-}$
- 7. $[BH_4]^-$
- 8. $[ClO_4]^-$ o ClO_4^-
- 9. $[PtCl_2{P(OEt)_3}_2]$
- 10. $[Al(OH)(OH_2)_5]^{2+}$
- 11. [PtBrCl(NH₃)(NO₂)]⁻
- 12. [PtCl₂(NH₃)(py)] #
- 13. $[Co(en)F_2(NH_3)_2]^+$; sin embargo $[CoF_2(NH_2CH_2CH_2NH_2)(NH_3)_2]^+$
- 14. $[Co(NH_3)_5(N_3)]^{2-}$

En numerosos casos, un fragmento formado por átomos diferentes y que se encuentra en una serie de compuestos se considera como una entidad que actúa como un átomo central y se cita como tal, aunque ello viole el orden alfabético de los ligandos. Por ejemplo, PO y UO2 se consideran entidades simples en los ejemplos 15 y 16.

Ejemplos:

- 15. POBr₃ (alfabéticamente, PBr₃O)
- 16. [UO₂Cl₂] (alfabéticamente, [UCl₂O₂])

En los derivados de los hidruros progenitores (véase el Capítulo IR-6), tradicionalmente no se observa el orden alfabético de los ligandos, en el sentido de que los átomos de hidrógeno que permanecen son los primeros ligandos que se colocan en la fórmula.

Ejemplos:

17. GeH₂F₂

[#] NT. La piridina se abrevia como py en lugar de pi. El criterio de utilizar las abreviaturas inglesas para los ligandos se mantiene en este libro.

- 18. SiH₂BrCl
- 19. B₂H₅Cl

Con los carbaboranos ha existido anteriormente alguna indecisión en el orden entre el B y el C.³ El orden 'B antes de C' recomendado aquí se ajusta a las ordenaciones por electronegatividad y por orden alfabético (es decir, es una excepción a la ordenación de Hill¹ de la Sección IR-4.2.1). Además, los átomos de carbono que reemplazan a átomos de boro del esqueleto se citan inmediatamente después del boro, independientemente de qué otros elementos se encuentren presentes. (Véase también la Sección IR-6.2.4.4).

Ejemplos:

- 20. B₃C₂H₅ (recomendado)
- 21. B₃C₂H₄Br (recomendado)

En los oxoácidos inorgánicos, existe una ordenación tradicional en las fórmulas en las que se escriben primero los átomos de hidrógeno 'ácidos' o 'reemplazables' (átomos de hidrógeno unidos al oxígeno), a los que sigue el átomo central, después, los átomos de hidrógeno 'no-reemplazables' (átomos de hidrógeno unidos directamente al átomo central) y finalmente el oxígeno. Este formato es una alternativa al modo de escribir las fórmulas como las de los compuestos de coordinación (véase la Sección IR-8.3).

Ejemplos:

- 22. HNO₃ (tradicional) o [NO₂(OH)] (coordinación)
- 23. H₂PHO₃ (tradicional) o [PHO(OH)₂] (coordinación)
- 24. H₂PO₄⁻ (tradicional) o [PO₂(OH)₂]⁻ (coordinación)
- 25. H₅P₃O₁₀ (tradicional) o [(HO)₂P(O)OP(O)(OH)OP(O)(OH)₂] (coordinación)
- 26. $(HBO_2)_n$ (tradicional) o $(B(OH)O_{n})_n$ (coordinación)

IR-4.4.3.3 Compuestos en cadena

En los compuestos en cadena que contienen tres o más elementos diferentes, la secuencia de símbolos atómicos debe hacerse generalmente según el orden en que están unidos los átomos en la molécula o ion, en lugar de utilizar el orden alfabético o el orden basado en la electronegatividad. Sin embargo, si se desea considerar formalmente a un compuesto como de coordinación, por ejemplo, con referencia a una discusión sobre el nombre de adición del compuesto, se puede usar un tipo de fórmula de compuesto de coordinación, como en el ejemplo 1 siguiente.

Ejemplos:

- 1. $NCS^- \circ SCN^- \text{ (no } CNS^-\text{)} = [C(N)S]^-, \text{ nitrurosulfurocarbonato}(1-)$
- 2. BrSCN (no BrCNS)
- 3. HOCN (ácido ciánico)
- 4. HONC (ácido fulmínico)

IR-4.4.3.4 Fórmulas de sales generalizadas

Si la fórmula de un compuesto que contiene tres o más elementos no se asigna fácilmente utilizando las dos secciones precedentes, el compuesto puede tratarse como una sal generalizada. Este término se utiliza para denotar cualquier compuesto en el que se puede identificar al menos un constituyente que es un ion positivo, o que puede clasificarse como electropositivo, o que es más electropositivo que los demás constituyentes y, al menos, un constituyente que es un ion negativo, o que puede clasificarse como electronegativo o que es más electronegativo que el resto de los constituyentes. El principio de ordenación, por tanto, es:

- (i) todos los constituyentes electropositivos preceden a todos los constituyentes electronegativos;
- (ii) se usa el orden alfabético dentro de cada uno de los dos grupos que constituyen la fórmula.

Ejemplos:

- 1. $KMgF_3$
- 2. MgCl(OH)
- 3. FeO(OH)
- 4. $NaTl(NO_3)_2$
- 5. $Li[H_2PO_4]$
- 6. NaNH₄[HPO₄]
- 7. Na[HPHO₃]
- 8. CuK₅Sb₂ o K₅CuSb₂
- 9. $K_5[CuSb_2]$
- 10. H[AuCl₄]
- 11. $Na(UO_2)_3[Zn(H_2O)_6](O_2CMe)_9$

La primera fórmula en el ejemplo 8 se obtiene al considerar que K y Cu son constituyentes electropositivos y Sb es electronegativo; la segunda si se considera que K es electropositivo y Cu y Sb electronegativos. Estas fórmulas no dan ninguna información estructural. Por el contrario, la fórmula del ejemplo 9 implica la presencia de la entidad de coordinación [CuSb₂]⁵⁻.

La desviación respecto del orden alfabético en los constituyentes de la misma clase está permitida para resaltar las semejanzas entre compuestos.

Ejemplo:

12. CaTiO₃ y ZnTiO₃ (en lugar de TiZnO₃)

Algunas sales generalizadas pueden ser tratadas como compuestos de adición, véase la Sección IR-4.4.3.5.

IR-4.4.3.5 *Compuestos de adición (formales)*

En las fórmulas de los compuestos de adición, o de los compuestos que pueden ser considerados formalmente como tales, las fórmulas de las entidades o moléculas componentes se citan en el orden creciente de su número; si se encontrasen en igual número, se citarán en orden alfabético en

el sentido de la Sección IR-4.4.2.2. En compuestos de adición que contienen agua, ésta se cita convencionalmente la última. Sin embargo, los componentes de los compuestos del boro ya no se tratan como excepciones.

Ejemplos:

- 1. 3CdSO₄⋅8H₂O
- 2. Na₂CO₃·10H₂O
- 3. $Al_2(SO_4)_3 \cdot K_2SO_4 \cdot 24H_2O$
- 4. AlCl₃·4EtOH
- 5. $8H_2S \cdot 46H_2O$
- 6. $C_6H_6\cdot NH_3\cdot Ni(CN)_2$
- 7. $BF_3 \cdot 2H_2O$
- 8. $BF_3 \cdot 2MeOH$

IR-4.4.4 Abreviaturas de los ligandos

Puesto que las abreviaturas se usan con profusión en la literatura química, es deseable un acuerdo sobre su uso y su significado. Esta sección proporciona las directrices para seleccionar las abreviaturas de los ligandos que se utilizan en las fórmulas de los compuestos de coordinación (Sección IR-9.2.3.4). Algunas de las abreviaturas de ligandos usadas habitualmente se encuentran en la Tabla VII y los diagramas de la mayor parte de los ligandos se muestran en la Tabla VIII.

Una abreviatura de un ligando orgánico debe derivarse de un nombre coherente con las reglas actuales de la nomenclatura sistemática de los compuestos orgánicos.⁴ En la Tabla VII se incluye un nombre no-sistemático de algunos ligandos si éste fue la fuente de la abreviatura y si esa abreviatura se utiliza todavía. Sin embargo, las nuevas abreviaturas se deben construir según las siguientes recomendaciones:

- (i) Las abreviaturas de los ligandos deben fórmularse de modo que eviten la confusión y malentendidos. Puesto que un lector puede no estar familiarizado con una abreviatura, ésta se debe explicar la primera vez que aparece en una publicación.
- (ii) No deben sugerirse nuevos significados para abreviaturas o acrónimos que ya tienen significados aceptados generalmente, por ejemplo, ADN, RMN, ESR, HPLC, Me (para metil), Et (para etil), etc.
- (iii) Una abreviatura debería sugerir fácilmente el nombre del ligando, como 'ida' para iminodiacetato. (Sin embargo, los nombres de los ligandos pueden llegar a violar las reglas de la nomenclatura si éstas se modifican; por ejemplo, iminodiacetato se sustituirá por azanodiildiacetato en la referencia 4. No obstante, las abreviaturas de los ligandos no tienen que cambiarse cada vez que cambian las reglas de la nomenclatura).
- (iv) Las abreviaturas deben ser tan cortas como sea posible, pero deben contener más de una letra o símbolo.
- (v) Se desaconseja el uso de nombres no-sistemáticos para derivar las abreviaturas de los ligandos.
- (vi) Las abreviaturas deben escribirse normalmente con letras minúsculas, con algunas excepciones muy establecidas:

- (a) las abreviaturas para alquil, aril y grupos similares, que tienen la primera letra mayúscula y el resto minúsculas, como Me (para metil), Ac (para acetil), Cp (para ciclopentadienil), etc.;
- (b) las abreviaturas que contienen símbolos atómicos, como [12]anoS₄;
- (c) la abreviaturas que contienen números romanos, como H₂ppIX para la protoporfirina IX;
- (d) las abreviaturas de los ligandos que contienen hidrones que se eliminan con facilidad (véase vii).

(N.B. Las abreviaturas de disolventes que se comportan como ligandos deben estar también en letra minúscula [por ejemplo, 'dmso' para dimetilsulfóxido {(metilsulfinil)metano}, 'thf' para tetrahidrofurano]; la costumbre escribir en mayúsculas la abreviatura de un disolvente cuando no se comporta como un ligando se desaconseja encarecidamente por tratarse de una distinción innecesaria.

- (vii) La hidronación de ligandos aniónicos, como 'ida', conduce a ácidos que pueden abreviarse añadiéndoles H, como Hida, H₂ida.
- (viii) Los ligandos que normalmente son neutros, y que también se comportan como ligandos al perder uno o más hidrones se abrevian añadiendoles –1H, –2H, etc. (incluyendo el número 1) después de la abreviatura normal del ligando. Por ejemplo, si Ph₂PCH₂PPh₂ (dppm) pierde un hidrón para dar [Ph₂PCHPPh₂]⁻, su abreviatura es dppm–1H; si perdiera dos hidrones, su abreviatura sería dppm–2H, etc.

IR-4.5 COMPUESTOS MODIFICADOS ISOTÓPICAMENTE.⁵

IR-4.5.1 Formalismo general

El número de masa de cualquier nucleido específico puede indicarse de la forma acostumbrada con un superíndice izquierdo delante del símbolo atómico correspondiente (véase la Sección IR-3.2).

Cuando es necesario citar diferentes nucleidos en la misma posición en una fórmula, los símbolos de los nucleidos se escriben en orden alfabético; si sus símbolos atómicos fueran idénticos el orden es el de número de masa creciente. Los compuestos modificados isotópicamente pueden clasificarse en compuestos *sustituidos isotópicamente* y compuestos *marcados isotópicamente*.

IR-4.5.2 Compuestos sustituidos isotópicamente

Un compuesto sustituido isotópicamente tiene una composición tal que todas las moléculas del compuesto tienen solamente el (o los) nucleido(s) indicado(s) en cada posición señalada. Los nucleidos sustituidos se indican insertando en la fórmula normal los números de masa precediendo a los símbolos atómicos adecuados como superíndices izquierdos.

Ejemplos:

- 1. H³HO
- 2. H³⁶Cl
- 3. $^{235}UF_6$
- 4. ⁴²KNa¹⁴CO₃
- 5. ³²PCl₃
- 6. $K[^{32}PF_6]$

7. $K_3^{42}K[Fe(^{14}CN)_6]$

IR-4.5.3 Compuestos marcados isotópicamente

IR-4.5.3.1 Tipos de marcado

Un compuesto marcado isotópicamente puede considerarse formalmente como una mezcla de un compuesto sin modificación isotópica y uno o más compuestos análogos sustituidos isotópicamente. Éstos pueden dividirse en varios tipos diferentes. Aquí se tratan brevemente los compuestos marcados específicamente y los marcados selectivamente, y ambos se describen con mayor detalle en la referencia 5.

IR-4.5.3.2 Compuestos marcados específicamente

Un compuesto marcado isotópicamente se llama marcado específicamente cuando un compuesto con sustitución isotópica específica se añade formalmente al compuesto análogo no modificado. Un compuesto marcado específicamente se indica encerrando entre corchetes el símbolo del (o los) nucleido(s) correspondiente(s) con sus subíndices multiplicadores (si los hubiere).

Ejemplos:

- 1. H[³⁶Cl]
- 2. [³²P]Cl₃
- 3. $[^{15}N]H_2[^2H]$
- 4. $[^{13}C]O[^{17}O]$
- 5. $[^{32}P]O[^{18}F_3]$
- 6. $Ge[^{2}H_{2}]F_{2}$

IR-4.5.3.3 *Compuestos marcados selectivamente*

Un compuesto marcado selectivamente puede considerarse como una mezcla de compuestos marcados específicamente. Esto se indica colocando como prefijo de la fórmula y entre corchetes el símbolo del nucleido (o los símbolos de los nucleidos) precedido(s) por el(los) localizador(es) necesario(s), pero sin subíndices multiplicadores

Ejemplos:

- 1. [³⁶Cl]SOCl₂
- 2. $[^{2}H]PH_{3}$
- 3. $[^{10}B]B_2H_5Cl$

El número de los posibles núcleidos marcados en una posición determinada puede indicarse por subíndices separados por punto y coma, que se añaden al (o a los) símbolo(s) atómico(s) en el descriptor isotópico.

Ejemplo:

4. [1-²H_{1;2}]SiH₃OSiH₂OSiH₃

IR-4.6 MODIFICADORES OPCIONALES DE LAS FÓRMULAS

IR-4.6.1 **Estado de oxidación**

El estado de oxidación de un elemento en una fórmula puede indicarse con un número de oxidación escrito como un índice superior derecho en números romanos. El estado de oxidación cero puede representarse por el número 0, pero normalmente no se escribe. Si un elemento aparece con más de un estado de oxidación en la misma fórmula, se repite el símbolo del elemento. A cada símbolo se le asigna un número de oxidación y se citan consecutivamente en orden creciente de los números.

Ejemplos:

- 1. $[P^{V_2}Mo_{18}O_{62}]^{6-}$
- 2. $K[Os^{VIII}(N)O_3]$
- 3. $[Mo^{V_2}Mo^{VI_4}O_{18}]^{2-}$
- 4. Pb^{II}₂Pb^{IV}O₄
- 5. $[Os^0(CO)_5]$
- 6. $[Mn^{-1}(CO)_5]^-$

Cuando no sea factible o razonable definir un estado de oxidación para cada miembro individual de un grupo (o clúster), el nivel de oxidación completo del grupo debe definirse por una carga iónica formal, indicada como se describe en la Sección IR-4.3, lo que evita el uso de estados de oxidación fraccionarios.

Ejemplos:

- 7. O_2^{-}
- 8. $Fe_4S_4^{3+}$

IR-4.6.2 Fórmulas de los radicales

Un radical es un átomo o molécula con uno o más electrones desapareados, que puede tener carga positiva, negativa o cero. Un electrón desapareado puede indicarse en una fórmula con un punto como superíndice que se coloca a la derecha del símbolo químico, de manera que no interfiera con los indicadores del número másico, del número atómico o de la composición. En el caso de diradicales, etc., el superíndice está precedido del correspondiente superíndice multiplicador. El punto de radical con su multiplicador, si lo tuviera, precede a la carga. Para evitar confusiones, el multiplicador y el punto de radical pueden colocarse entre paréntesis.

Los metales y sus iones o complejos poseen a menudo electrones desapareados, pero por convenio, se consideran que no son radicales y no se utilizan los puntos de radical en sus fórmulas. Sin embargo, pueden existir ocasiones en las que un ligando radical esté unido a un metal o a un ion metálico, en cuyo caso es deseable usar el punto de radical.

[#] NT. Se utiliza la expresión di-radicales (con el guión) en lugar de dirradicales para mantener una grafía similar a la inglesa.

Ejemplos:

- 1. H•
- 2. HO*
- 3. NO₂•
- 4. $O_2^{2^{\bullet}}$
- 5. $O_2^{\bullet-}$
- 6. BH₃•+
- 7. PO₃•2-
- 8. NO^{(2•)-}
- 9. $N_2^{(2\bullet)2+}$

IR-4.6.3 Fórmulas de los compuestos ópticamente activos

El signo de la rotación óptica se coloca entre paréntesis y la longitud de onda (en nm) se indica con un subíndice derecho. El símbolo completo se coloca delante de la fórmula y se refiere a la línea D del sodio, si no se especifica nada en otro sentido.

Ejemplo:

1. $(+)_{589}$ -[Co(en)₃]Cl₃

IR-4.6.4 Indicación de los estados excitados

Los estados electrónicos excitados pueden indicarse con un asterisco como superíndice derecho. Este uso no distingue entre diferentes estados excitados.

Ejemplos:

- 1. He*
- 2. NO*

IR-4.6.5 Descriptores estructurales

Los descriptores estructurales del tipo *cis*-, *trans*-, etc., se encuentran en la Tabla V. Generalmente, estos descriptores se usan como prefijos en letra cursiva y se conectan a la fórmula con un guión.

Ejemplos:

- 1. cis-[PtCl₂(NH₃)₂]
- 2. $trans-[PtCl_4(NH_3)_2]$

El descriptor µ designa un átomo o grupo puente entre centros de coordinación.

Ejemplo:

3. $[(H_3N)_5Cr(\mu\text{-OH})Cr(NH_3)_5]^{5+}$

IR-4.7 REFERENCIAS

- 1. Éste es el llamado orden de Hill. Véase E. A. Hill, *J. Amer. Chem. Soc.*, **22**, 478–494 (1900).
- 2. Las recomendaciones anteriores prescribían el orden alfabético en lugar de la electronegatividad para compuestos intermetálicos (véase la Sección I-4.6.6 de *Nomenclature of Inorganic Chemistry, IUPAC Recommendations 1990*, G. J. Leigh (Ed.), Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1990.#
- 3. Por ejemplo, la ordenación de B y C en las fórmulas era inconsistente en *Nomenclature of Inorganic Chemistry, IUPAC Recommendations 1990*, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1990.
- 4. *Nomenclature of Organic Chemistry, IUPAC Recommendations*, W. H. Powell y H. Favre (Eds.), Royal Society of Chemistry, en preparación.
- 5. Capítulo II-2 de *Nomenclature of Inorganic Chemistry II, IUPAC Recommendations 2000*, J. A. McCleverty y N. G. Connelly (Eds.), Royal Society of Chemistry, 2001. (El *Libro Rojo II*)

-

[#] NT. *Nomenclatura de Química Inorgánica, Recomendaciones de 1990*, G. J. Leigh (Ed.). Versión española elaborada por Luis F. Bertello y Carlos Pico Marín, Editorial Centro de Estudios Ramón Areces S.A., Madrid 1990.

IR-5 Nomenclatura de composición y visión panorámica de los nombres de los iones y radicales

CONTENIDO

IR	5	1	T,	1	ro	d,	10	<u></u>	Á٠	
ıк	- ``		- 11	M.	r()	(11	10	\cdot	OT	1

- IR-5.2 Nombres estequiométricos de los elementos y los compuestos binarios
- IR-5.3 Nombres de los iones y los radicales
 - IR-5.3.1 Generalidades
 - IR-5.3.2 Cationes
 - IR-5.3.2.1 Generalidades
 - IR-5.3.2.2 Cationes monoatómicos
 - IR-5.3.2.3 Cationes homopoliatómicos
 - IR-5.3.2.4 Cationes heteropoliatómicos
 - IR-5.3.3 Aniones
 - IR-5.3.3.1 Generalidades
 - IR-5.3.3.2 Aniones monoatómicos
 - IR-5.3.3.3 Aniones homopoliatómicos
 - IR-5.3.3.4 Aniones heteropoliatómicos
- IR-5.4 Nombres estequiométricos generalizados
 - IR-5.4.1 Orden de citación de los constituyentes electropositivos y electronegativos
 - IR-5.4.2 Indicación de las proporciones de los constituyentes
 - IR-5.4.2.1 Uso de los prefijos multiplicadores
 - IR-5.4.2.2 Uso de los números de carga y de oxidación
 - IR-5.4.2.3 Constituyentes monoatómicos múltiples *frente a* constituyentes homopoliatómicos
- IR-5.5 Nombres de los compuestos de adición
- IR-5.6 Resumen
- IR-5.7 Referencias

IR-5.1 INTRODUCCIÓN

La nomenclatura de composición está basada formalmente en la composición, y no en la estructura, y puede ser la única elección si se dispone de una información estructural escasa o nula o si se va a transmitir una información estructural mínima.

El tipo de nombre de composición más sencillo es un nombre *estequiométrico*, que es solamente el reflejo de la fórmula empírica (Sección IR-4.2.1) o de la fórmula molecular (Sección IR-4.2.2) del compuesto. Las proporciones de los elementos constituyentes en los nombres estequiométricos pueden indicarse de varias maneras, utilizando prefijos multiplicadores, números de oxidación o números de carga.

En algunos casos, un compuesto puede considerarse que está formado por constituyentes que pueden tener nombres propios de varios tipos (incluyendo nombres estequiométricos). En tal caso, el nombre completo del compuesto se construye con los nombres de los constituyentes indicando sus proporciones. Una categoría de dichos nombres de composición es la de *nombres estequiométricos generalizados* (véase la Sección IR-5.4) en la que las diferentes partes pueden ser

nombres de iones mono o poliatómicos. Por esta razón, se incluye la Sección IR-5.3, que esta dedicada a la nomenclatura de los iones. Otra categoría, descrita en la Sección IR-5.5 la constituyen los nombres diseñados para los *compuestos de adición*, que tienen un formato propio.

IR-5.2 NOMBRES ESTEQUIOMÉTRICOS DE LOS ELEMENTOS Y LOS COMPUESTOS BINARIOS

Un nombre estequiométrico puro no transmite ninguna información sobre la estructura del compuesto.

En el caso más sencillo, en que la especie a denominar consta de un solo elemento, el nombre se forma añadiendo el prefijo multiplicador pertinente al nombre del elemento (p.ej. S₈, octaazufre), como se muestra en la Sección IR-3.4.3.

Al construir el nombre estequiométrico de un compuesto binario, uno de los elementos se clasifica como el constituyente electropositivo y el otro como el constituyente electronegativo. El constituyente electropositivo es, *por convenio*, el elemento que aparece en último lugar en la secuencia de la Tabla VI* y su nombre es el del propio elemento sin modificación (Tabla I). El nombre del constituyente electronegativo se construye modificando el nombre del elemento con la terminación '-*uro*' [-*ide*, en terminología inglesa], tal como se explica con detalle en la Sección IR-5.3.3.2 dedicada a los aniones monoatómicos. Los nombres de los elementos modificados con la desinencia '-*uro*' se encuentran en la Tabla IX.

El nombre estequiométrico del compuesto se forma combinando el nombre del constituyente electronegativo, que se cita el primero, con el del electropositivo, ambos debidamente calificados con los prefijos multiplicadores necesarios ('mono', 'di', 'tri', 'tetra', 'penta', etc., dados en la Tabla IV*). Los prefijos multiplicadores preceden a los nombres a los que afectan y se les unen directamente sin espacios ni guiones. Las vocales finales de los prefijos numéricos no deben elidirse (aunque una excepción permitida por el uso general es 'monóxido' en lugar de 'monoóxido'). Las dos partes del nombre se separan por la preposición 'de' con un espacio a ambos lados.

Los nombres estequiométricos pueden corresponder a la fórmula empírica o a una fórmula molecular diferente de la fórmula empírica (compárense los ejemplos 3 y 4 que siguen a continuación).

Ejemplos:

1. HCl cloruro de hidrógeno 2. NO óxido de nitrógeno, o monóxido de nitrógeno, o monóxido de nitrógeno 3. NO₂dióxido de nitrógeno 4. N_2O_4 tetraóxido de dinitrógeno 5. Cl₂O dicloruro de oxígeno 6. ClO₂ cloruro de dioxígeno 7. Fe_3O_4 tretraóxido de trihierro 8. SiC carburo de silicio 9. SiCl₄ tetracloruro de silicio

difosfuro de tricalcio o fosfuro de calcio

.

10. Ca_3P_2

^{*} Las Tablas numeradas con números romanos se encuentran juntas al final de este libro.

11. NiSn estannuro de níquel

12. Cu₅Zn₈ octacincuro de pentacobre

13. Cr₂₃C₆ hexacarburo de tricosacromo

Los prefijos multiplicadores no son necesarios en los nombres binarios si no hay ambigüedad sobre la estequiometría del compuesto (como en el ejemplo 10 anterior). El prefijo 'mono' es, hablando estrictamente, superfluo y se necesita solamente para enfatizar la estequiometría cuando se comentan sustancias relacionadas por la composición, como los ejemplos 2, 3 y 4 anteriores).

Alternativamente, las proporciones de los constituyentes pueden indicarse usando números de oxidación o números de carga (Sección IR-5.4.2).

Para formar el nombre de composición de los compuestos que contienen más de dos elementos se necesitan convenios adicionales (véanse las Secciones IR-5.4 e IR-5.5).

IR-5.3 NOMBRES DE LOS IONES Y LOS RADICALES

IR-5.3.1 Generalidades

En un nombre estequiométrico no es necesario especificar las cargas de los átomos. Sin embargo, en muchos casos se sabe que los átomos o los grupos de átomos tienen una carga determinada. En la nomenclatura de composición, el nombre de un compuesto puede incluir los nombres de los iones individuales construidos como nombres estequiométricos, o bien, según otros principios descritos más adelante.

IR-5.3.2 Cationes

IR-5.3.2.1 Generalidades

Un catión es una especie monoatómica o poliatómica que tiene una o más cargas positivas. La carga de un catión puede indicarse en los nombres y en las fórmulas usando el número de carga, o bien, en el caso de los cationes que se nombran de forma aditiva, con el (o los) número(s) de oxidación del átomo central (de los átomos centrales). Los números de oxidación y de carga se comentan en la Sección IR-5.4.2.2.

IR-5.3.2.2 Cationes monoatómicos

El nombre de un catión monoatómico es el del elemento con el número de carga pertinente añadido entre paréntesis. Los electrones despareados en cationes monoatómicos puede indicarse con un punto de radical, es decir, un punto centrado en la línea, delante de la carga y precedido por un número si fuese necesario.

Ejemplos:

1. Na^+ sodio(l+)

2. Cr^{3+} cromo(3+)

3. Cu^+ cobre(1+)

4. Cu^{2+} cobre(2+)

5. I^{+} yodo(1+)

```
6. H<sup>+</sup> hidrógeno(1+), hidrón
7. <sup>1</sup>H<sup>+</sup> protio(1+), protón
8. <sup>2</sup>H<sup>+</sup> deuterio(1+), deuterón
9. <sup>3</sup>H<sup>+</sup> tritio(1+), tritón
10. He<sup>•+</sup> helio(•1+)
11. O<sup>•+</sup> oxígeno(•1+)
12. N<sub>2</sub><sup>(2•)2+</sup> dinitrógeno(2•2+)
```

Los nombres de los isótopos del hidrógeno se comentan en la Sección IR-3.3.2.

IR-5.3.2.3 Cationes homopoliatómicos

Los cationes homopoliatómicos se nombran añadiendo el número de carga al nombre estequiométrico de la especie neutra correspondiente, es decir, al nombre del elemento con el prefijo multiplicador adecuado. Puede añadírsele un punto o puntos de radical para indicar la presencia de electrones desapareados.

Ejemplos:

```
    O<sub>2</sub><sup>+</sup> u O<sub>2</sub><sup>•+</sup> dioxígeno(1+), o dioxígeno(•1+)
    S<sub>4</sub><sup>2+</sup> tetraazufre(2+)
    Hg<sub>2</sub><sup>2+</sup> dimercurio(2+)
    Bi<sub>5</sub><sup>4+</sup> pentabismuto(4+)
    H<sub>3</sub><sup>+</sup> trihidrógeno(1+)
```

IR-5.3.2.4 *Cationes heteropoliatómicos*

Los cationes heteropoliatómicos se nombran generalmente mediante la nomenclatura de sustitución (véase la Sección IR-6.4) o de adición (véase el Capítulo IR-7). Los nombres de sustitución no requieren un número de carga, porque el nombre por sí mismo implica la carga (véanse los ejemplos 2 y 4 siguientes). Para indicar la presencia de electrones desapareados, se puede añadir puntos de radical a los nombres de adición.

Unos pocos cationes tienen nombres vulgares no sistemáticos y que son todavía aceptables.

Ejemplos:

1.	NH_4^+	azanio (de sustitución), o amonio (no sistemático, aceptado por la IUPAC)
2.	H_3O^+	oxidanio (de sustitución), u oxonio (no sistemático aceptado por la IUPAC;
		no es hidronio)
3.	PH_4^{+}	fosfanio (de sustitución)
4.	H_4O^{2+}	oxidanodiio (de sustitución)
5.	SbF_4^{+}	tetrafluoroestibanio (de sustitución), o tetrafluoruroantimonio(1+) o
		tetrafluoruroantimonio(V) (ambos de adición)

6. BH₃^{•+} boranioilo (de sustitución), o trihidruroboro(•1+) (de adición)

Pueden encontrarse más ejemplos en la Tabla IX.

IR-5.3.3 **Aniones**

IR-5.3.3.1 Generalidades

Un anión es una especie monoatómica o poliatómica que tiene una o más cargas negativas. La carga de un anión se indica en el nombre usando el número de carga, o con el número de oxidación del átomo central o de los átomos centrales si se trata de un anión nombrado mediante la nomenclatura de adición.

Los números de oxidación y de carga se comentan en la Sección IR-5.4.2.2.

Las terminaciones de los nombres de los aniones son: '-uro' (para las especies monoatómicas, homopoliatómicas o heteropoliatómicas cuyo nombre procede de un hidruro progenitor), '-ato' (para las especies heteropoliatómicas nombradas por adición), e '-ito', que se usa en unos pocos casos que se aceptan todavía, pero que no derivan de la nomenclatura sistemática actual. Cuando no exista ambigüedad puede omitirse el número de carga, como en el ejemplo 1 que sigue a continuación. Los nombres basados en hidruros progenitores no llevan números de carga porque el nombre en sí implica la carga (ejemplos 3 y 4 siguientes).

Ejemplos:

1. Cl⁻ cloruro(1-), o cloruro

2. S_2^{2-} disulfuro(2–)

3. PH_2^- fosfanuro

4. PH²⁻ fosfanodiuro

5. $[CoCl_4]^{2-}$ tetraclorurocobaltato(2–), o tetraclorurocobaltato(II)

6. NO₂ dioxidonitrato(1–), o nitrito

IR-5.3.3.2 *Aniones monoatómicos*

El nombre de un anión monoatómico es el nombre del elemento (Tabla I) modificado para que lleve el indicador de anión '-uro', que se forma, o bien reemplazando la terminación del nombre del elemento ('eso', 'ico', 'io', 'o', 'ógeno', 'ígeno', 'ono', u 'oro') por 'uro', o añadiendo directamente la terminación '-uro' al nombre del elemento.

Ejemplos:

1. cloro, cloruro

2. carbono, carburo

3. xenón, xenonuro[#]

4. wolframio, wolframuro

5. bismuto, bismuturo

٠

[#] NT. El anion del xenón debería llamarse xenuro, por analogía con los elementos terminados en inglés en '-*on*', como *carbon*.

- 6. sodio, soduro
- 7. potasio, potasuro

En un caso, se ha tenido que elegir un nombre abreviado: de germanio, germuro. El nombre sistemático 'germanuro' se reserva para el anión GeH₃⁻.

Algunos nombres de aniones monoatómicos se basan en la raíz del nombre del elemento en latín. En estos casos, la terminación 'um' o 'ium' se reemplaza por '-*uro*'.

Ejemplos:

- 8. plata, argentum, argenturo
- 9. oro, aurum, aururo
- 10. cobre, cuprum, cupruro
- 11. hierro, ferrum, ferruro
- 12. plomo, plumbum, plumburo
- 13. estaño, stannum, estannuro

El nombre de todos los elementos, modificados de esta manera, se encuentra en la Tabla IX. Los números de carga y los puntos de radical se pueden añadir, cuando sea procedente, para identificar completamente a los aniones.

Ejemplos:

14.
$$O^{2-}$$
 óxido(2–), u óxido

16. N^{3-} nitruro(3–), o nitruro

IR-5.3.3.3 Aniones homopoliatómicos

Los aniones homopoliatómicos se nombran añadiendo el número de carga al nombre estequiométrico de las especies neutras correspondientes, es decir, al nombre del elemento con el prefijo multiplicador pertinente. Puede añadirse el punto de radical si fuera conveniente.

En algunos casos, los nombres no sistemáticos son, todavía, alternativas aceptables.

Ejemplos:

		Nombre sistemático	Nombre alternativo aceptado por la IUPAC
1.	$O_2^- u O_2^{\bullet-}$	dióxido(1−) o dióxido(•1−)	superóxido
2.	O_2^{2-}	dióxido(2–)	peróxido
3.	O_3^-	trióxido(1-)	ozónido
4.	I_3^-	triyoduro(1–)	
5.	$\operatorname{Cl_2}^{\bullet-}$	dicloruro(●1−)	
6.	C_2^{2-}	dicarburo(2–)	acetiluro

7.	N_3^-	trinitruro(1–)	azida [#]
8.	S_2^{2-}	disulfuro(2–)	
9.	$\mathrm{Sn_5}^{2-}$	pentaestannuro(2-)	
10.	Pb ₉ ⁴⁻	nonaplumburo(4–)	

En algunos casos, puede considerarse que los aniones homopoliatómicos se derivan de un hidruro progenitor por eliminación de hidrones (véase la Sección IR-6.4).

Ejemplos:

- 11. O_2^{2-} dioxidanodiuro
- 12. S₂²⁻ disulfanodiuro

IR-5.3.3.4 Aniones heteropoliatómicos

Los aniones poliatómicos se nombran generalmente mediante la nomenclatura de sustitución (véase la Sección IR-6.4.4) o la de adición (véanse el Capítulo IR-7 y la Sección IR-9.2.2). A los nombres de adición se les puede añadir un punto de radical para indicar la presencia de electrones desapareados.

Algunos aniones heteropoliatómicos tienen todavía nombres vulgares no sistemáticos y aceptados por la IUPAC.

Ejemplos:

1.	$\mathrm{NH_2}^-$	azanuro (de sustitución), dihidruronitrato(1–) (de adición), o amido (aceptado y no sistemático)
2.	GeH_3^-	germanuro (de sustitución), o trihidrurogermanato(1-) (de adición)
3.	HS ⁻	sulfanuro (de sustitución), o hidrurosulfato(1-) (de adición)
4.	H_3S^-	sulfanuuro, o λ^4 -sulfanuro (ambos de sustitución), o trihidrurosulfato(1–) (de adición)
5.	$H_2S^{\bullet-}$	sulfanuidilo o λ^4 -sulfanidilo (ambos de sustitución), o
		dihidrurosulfato(●1−) (de adición)
6.	SO_3^{2-}	trioxidosulfato(2-) (de adición), o sulfito (aceptado y no sistemático)
7.	ClO ⁻	clorurooxigenato(1–) (de adición), o hipoclorito (aceptado y no sistemático)
8.	ClO ₃	trioxidoclorato(1-) (de adición), o clorato (aceptado y no sistemático)
9.	$[PF_6]^-$	hexafluoro-λ ⁵ -fosfanuuro (de sustitución), o hexafluorurofosfato(1–) (de adición)
10.	$\left[CuCl_4\right]^{2-}$	tetraclorurocuprato(II) (de adición)
11.	$[Fe(CO)_4]^{2-}$	tetracarbonilferrato(-II) (de adición)

Todos los nombres de los aniones aceptados por la IUPAC, pero que no son completamente

-

[#] NT. La traducción del término inglés *azide* al español es azida (y no 'aziduro', como puede encontrarse en algunas obras de nomenclatura anteriores a ésta).

sistemáticos se encuentran en la Tabla IX.

Obsérvese que en la referencia 1, los aniones radicales que contienen solamente hidrógeno y otro elemento se nombraron de forma aditiva utilizando la desinencia '-*uro*' en lugar de '-*ato*' (como en el Ejemplo 5 anterior). Actualmente, la IUPAC desaprueba hacer excepciones al sistema general de nomenclatura de adición en estos casos particulares.

Cuando uno o más hidrones están unidos a un anión en posiciones desconocidas, o en posiciones que no se pueden o no se desean especificar, puede utilizarse la *nomenclatura de hidrógeno* (Sección IR-8.4). Dichos nombres pueden usarse también para compuestos más sencillos, como los oxoácidos parcialmente deshidronados, de los que algunos tienen nombres abreviados, como hidrogenocarbonato, dihidrogenofosfato, etc. Todos estos nombres abreviados, que se aceptan todavía, se encuentran en la Sección IR-8.5.

Ejemplos:

- 12. HMo₆O₁₉ hidrogeno(nonadecaoxidohexamolibdato)(1–)
- 13. HCO₃ hidrogeno(trioxidocarbonato)(1–), o hidrogenocarbonato
- 14. H₂PO₄ dihidrogeno(tetraoxidofosfato)(1–), o dihidrogenofosfato

IR-5.4 NOMBRES ESTEQUIOMÉTRICOS GENERALIZADOS

IR-5.4.1 Orden de citación de los constituyentes electropositivos y electronegativos

Los constituyentes del compuesto a nombrar se dividen formalmente en electropositivos y electronegativos. Al menos tiene que haber un constituyente electronegativo y uno electropositivo. Por definición, los cationes son electropositivos y los aniones electronegativos, y por convenio, los elementos electropositivos se encuentran más adelante que los electronegativos en la Tabla VI.

En principio, la división en constituyentes electropositivos y electronegativos es arbitraria si el compuesto tiene más de dos elementos. Sin embargo, decidir donde se encuentra la división no es un problema que se plantee frecuentemente en la práctica.

Los nombres de los constituyentes electronegativos preceden a los electropositivos en el nombre completo. El orden de citación es el alfabético dentro de cada clase de constituyentes (para ello se ignoran los prefijos multiplicadores) con la excepción del hidrógeno, que se cita siempre el último de los componentes electropositivos si se encuentra realmente clasificado como un constituyente electropositivo.

Este principio para la construcción de nombres estequiométricos generalizados es análogo al de la construcción de "fórmulas de sales generalizadas" de la Sección IR-4.4.3.4. Sin embargo, el orden de citación en un nombre estequiométrico generalizado no es necesariamente el mismo que el orden de los símbolos en la correspondiente fórmula de la sal generalizada, como puede observarse en los ejemplos 4, 5 y 7 que siguen a continuación.

Los siguientes nombres estequiométricos generalizados, que se basan en constituyentes de un solo elemento, no conllevan ninguna información sobre su estructura.

Ejemplos:

1.	IBr	bromuro de yodo
2.	PBrClI	bromuro cloruro yoduro de fósforo
3.	ArHF o ArFH	fluoruro de argón e hidrógeno, o fluoruro hidruro de argón
4.	ClOF u OClF	fluoruro de cloro y oxígeno, o cloruro fluoruro de oxígeno

5. CuK₅Sb₂ o K₅CuSb₂ diantimoniuro de cobre y pentapotasio, o diantimoniuro cupruro de pentapotasio

Obsérvese en estos ejemplos que el orden de dos elementos cualesquiera en el nombre depende de la división arbitraria de los elementos en constituyentes electropositivos y electronegativos. La misma regla se aplica al orden de los símbolos de los elementos en las fórmulas, como se ilustró en la Sección IR-4.4.3.4. Los nombres de adición que representan la estructura real de los compuestos de los ejemplos 3 y 4 (FArH y FClO, respectivamente) se encuentran en la Sección IR-7.2.

En algunos casos, no es posible o no es deseable el uso de la nomenclatura de adición o de sustitución para nombrar un ion en ausencia de información estructural. En dichos casos, es preferible dar un nombre estequiométrico y añadir el número de carga. Los paréntesis se necesitan para establecer con claridad que el número de carga indica la carga total del ion.

Ejemplo:

6. Cl_2O_2^+ (dicloruro de dioxígeno)(1+)

Cuando aparecen nombres de iones poliatómicos como constituyentes en un nombre estequiométrico generalizado, en él hay implicada, a menudo, cierta cantidad de información estructural.

Ejemplo:

7. NaNH₄[HPO₄] hidrogenofosfato de amonio y sodio

IR-5.4.2 Indicación de las proporciones de los constituyentes

IR-5.4.2.1 Uso de los prefijos multiplicadores

Las proporciones de los constituyentes, ya sean monoatómicos o poliatómicos, se indican en los nombres estequiométricos generalizados por medio de prefijos multiplicadores, como en el caso de los constituyentes de compuestos binarios (Sección IR-5.2).

Ejemplos:

1. Na₂CO₃ trioxidocarbonato de disodio, o carbonato de sodio

2. $K_4[Fe(CN)_6]$ hexacianuroferrato de tetrapotasio

3. PCl₃O tricloruro óxido de fósforo

4. KMgCl₃ tricloruro de magnesio y potasio

Cuando el propio nombre del constituyente comienza por un prefijo multiplicador (como en disulfato, dicromato, trifosfato, tetraborato, etc.), o cuando puede surgir alguna otra ambigüedad, se usan los prefijos multiplicadores alternativos 'bis', 'tris', 'tetrakis', 'pentakis', etc. (Tabla IV) y el nombre del grupo afectado por el prefijo alternativo se coloca entre paréntesis.

Ejemplos:

5. Ca(NO₃)₂ bis(trioxidonitrato) de calcio, o nitrato de calcio

6. $(UO_2)_2SO_4$ tetraoxidosulfato de bis(dioxidouranio)

7. Ba(BrF₄)₂ bis(tetrafluorurobromato) de bario

U(S₂O₇)₂ bis(disulfato) de uranio
 Ca₃(PO₄)₂ bis(fosfato) de tricalcio
 Ca₂P₂O₇ difosfato de calcio
 Ca(HCO₃)₂ bis(hidrogenocarbonato) de calcio

IR-5.4.2.2 Uso de los números de carga y de oxidación

Se puede aportar información sobre las proporciones de los constituyentes en los nombres utilizando uno de los dos siguientes recursos: el número de carga, que define la carga iónica, y el número de oxidación, que define el estado de oxidación. En la nomenclatura se prefiere el número de carga, porque la determinación del número de oxidación puede ser ambigua y subjetiva en ciertas ocasiones. Por tanto, es aconsejable usar los números de oxidación solamente cuando no haya incertidumbre en su asignación.

El *número de carga* es un número cuya magnitud es la carga iónica. Se escribe entre paréntesis inmediatamente después del nombre de un ion y sin espacio entre ellos. La carga se escribe con números arábigos seguido de su signo. Obsérvese que la carga unidad (1) se indica siempre, a diferencia de las descripciones de las cargas con superíndices que se usan en las fórmulas. El número de carga no se usa después del nombre de una especie neutra.

Ejemplos:

FeSO₄ sulfato de hierro(2+)
 Fe₂(SO₄)₃ sulfato de hierro(3+)
 (UO₂)₂SO₄ sulfato de dioxidouranio(1+)
 UO₂SO₄ sulfato de dioxidouranio(2+)
 K₄[Fe(CN)₆] hexacianuroferrato(4-) de potasio
 [Co(NH₃)₆]Cl(SO₄) cloruro sulfato de hexaamminocobalto(3+)

El *número de oxidación* de un elemento (véanse las Secciones IR-4.6.1 e IR-9.1.2.8) se indica con un número romano encerrado entre paréntesis que sigue inmediatamente al nombre (modificado con la terminación '-ato' si fuese necesario) del elemento al que se refiere. El número de oxidación puede ser positivo, negativo o cero (representado por el número 0). Se sobreentiende que un número de oxidación es siempre positivo, a menos que se use explícitamente el signo menos (–) (el signo positivo no se usa nunca). Los números de oxidación fraccionarios no se usan en nomenclatura.

Ejemplos:

7.	PCl ₅	cloruro de fósforo(V)
8.	$Na[Mn(CO)_5]$	pentacarbonilmanganato(-I) de sodio
9.	$[Fe(CO)_5]$	pentacarbonilhierro(0)

Para deducir los números de oxidación, cuyo uso es muy común en los nombres de los compuestos de los elementos de transición, se observan varios convenios. El hidrógeno se considera positivo (número de oxidación I) cuando está combinado con elementos no-metálicos, y negativo (número de oxidación –I) cuando está combinado con elementos metálicos. Los grupos orgánicos unidos a átomos metálicos se tratan unas veces como aniones (por ejemplo, el ligando metilo se considera

habitualmente que es el ion metanuro CH₃⁻) y otras veces como neutros (v.g. el monóxido de carbono). Los enlaces entre átomos de la misma especie no contribuyen al número de oxidación.

Ejemplos:

10. N_2O	óxido de nitrógeno(I)
11. NO ₂	óxido de nitrógeno(IV)
12. Fe ₃ O ₄	óxido de hierro(II) y dihierro(III)
13. MnO ₂	óxido de manganeso(IV)
14. CO	óxido de carbono(II)
15. FeSO ₄	sulfato de hierro(II)
16. $Fe_2(SO_4)_3$	sulfato de hierro(III)
17. SF ₆	fluoruro de azufre(VI)
18. $(UO_2)_2SO_4$	sulfato de dioxidouranio(V)
19. UO ₂ SO ₄	sulfato de dioxidouranio(VI)
20. $K_4[Fe(CN)_6]$	hexacianuroferrato(II) de potasio, o hexacianuroferrato(4-) de potasio
21. K ₄ [Ni(CN) ₄]	tetracianuroniquelato(0) de potasio, o tetracianuroniquelato(4–) de potasio
22. Na ₂ [Fe(CO) ₄]	tetracarbonilferrato(–II) de sodio, o tetracarbonilferrato(2–) de sodio
23. $[Co(NH_3)_6]Cl(SO_4)$	cloruro sulfato de hexaamminocobalto(III), o cloruro sulfato de hexaamminocobalto(3+)
24. Fe ₄ [Fe(CN) ₆] ₃	hexacianuroferrato(II) de hierro(III), o hexacianuroferrato(4–) de hierro(3+)

Conviene advertir que no se recomienda el uso de los números de oxidación al nombrar iones homopoliatómicos para evitar ambigüedades. Los números de oxidación se refieren a los átomos individuales del elemento en cuestión, incluso si están unidos a un nombre que contiene un prefijo multiplicador, como en el ejemplo 12 inmediatamente anterior. Para ajustarse a esta práctica, dimercurio(2+) (véase la Sección IR-5.3.2.3) debería llamarse dimercurio(I); dióxido(2-) (véase la Sección IR-5.3.3.3) sería dióxido(-I) y los iones pentabismuto(4+) (véase la Sección IR-5.3.2.3) y dióxido(1-) (véase la Sección IR-5.3.3.3), que tienen números de oxidación formalmente fraccionarios, éstos no se deberían mencionar.

IR-5.4.2.3 Constituyentes monoatómicos múltiples frente a constituyentes homopoliatómicos

Debe tenerse un especial cuidado para distinguir los constituyentes monoatómicos múltiples de los constituyentes poliatómicos. Esta diferencia no se percibe a menudo por inspección de la fórmula, aunque está implícita de forma tácita.

Ejemplos:

1. TII₃ tris(yoduro) de talio, o yoduro de talio(III), o yoduro de talio(3+)

2. $Tl(I_3)$ triyoduro(1–) de talio, o (triyoduro) de talio(I), o (triyoduro) de talio(1+)

Los dos compuestos de los ejemplos 1 y 2 tienen la misma fórmula global, TlI₃, y ambos se pueden nombrar con el nombre estequiométrico sencillo triyoduro de talio. Sin embargo, es posible –y habitualmente deseable– que con el nombre se comunique más información.

El compuesto del ejemplo 1 está constituido por yoduro, Γ , y talio en la proporción 3:1, mientras que el compuesto del ejemplo 2 consta de triyoduro(1–), I_3^- , y talio en la proporción 1:1. Por lo tanto, en el primer nombre del primer compuesto, el prefijo numérico 'tris' se usa para dejar completamente claro que están implicados tres iones yoduro y que no lo está el ion triyoduro. Los nombres alternativos usan el número de oxidación III para el talio y el número de carga 3+, respectivamente, para expresar indirectamente las proporciones de los constituyentes.

En el primer nombre del ejemplo 2, es evidente que el constituyente electronegativo es una entidad homopoliatómica de carga –1. Los dos nombres siguientes indican esta característica de forma indirecta al añadir el número de oxidación o el número de carga al nombre talio; la inclusión del nombre de la parte electronegativa entre paréntesis reafirma que es una entidad heteropoliatómica.

También se aceptan para ambos compuestos los nombres completamente explícitos que incluyen el número de carga del ion talio, aunque sean parcialmente redundantes. Así, los nombres tris(yoduro) de talio(3+) y triyoduro(1-) de talio(1+) para los ejemplos 1 y 2, respectivamente, pueden ser preferibles en contextos sistemáticos del tipo índices y registros [en bases de datos].

Ejemplos:

- 3. HgCl₂ dicloruro de mercurio, o cloruro de mercurio(II), o cloruro de mercurio(2+)
- 4. Hg₂Cl₂ dicloruro de dimercurio, o dicloruro de (dimercurio), o cloruro de dimercurio(2+)

En el ejemplo 4, el primer nombre es puramente estequiométrico, mientras que el segundo nombre contiene más información al indicar que el compuesto contiene un catión homodiatómico. En el último nombre, donde se especifica la carga del dicatión, el prefijo 'di' para el 'cloruro' no es necesario.

Ejemplos:

- 5. Na₂S₃ (trisulfuro) de disodio (lo que indica la presencia del anión poliatómico), o trisulfuro(2–) de sodio (no es necesario el prefijo multiplicador del nombre del catión por indicarse la carga del anión)
- 6. Fe₂S₃ tris(sulfuro) de dihierro, o sulfuro de hierro(III)

Las sales que contienen aniones que son cadenas S_n^{2-} y las que contienen varios aniones S^{2-} se denominan polisulfuros, pero, tal como se ha demostrado, se deberían nombrar de manera que los nombres permitieran una distinción entre ambos casos.

Ejemplos:

- 7. K₂O óxido de dipotasio
- 8. K₂O₂ (dióxido) de dipotasio, o dioxido(2–) de potasio
- 9. KO₂ (dióxido) de monopotasio, o dióxido(1–) de potasio
- 10. KO₃ (trióxido) de potasio, o trióxido(1–) de potasio

Evidentemente, un nombre estequiométrico simple como 'dióxido de potasio', aunque hablando estrictamente, es inequívoco cuando se refiere al compuesto del ejemplo 9, puede ser malinterpretado con facilidad. En otros casos, basándose en el saber químico no hay posibilidad de confusión en la práctica y, probablemente, el nombre estequiométrico sencillo será el que se use con mayor frecuencia, como en los ejemplos 11 y 12 que siguen a continuación.

Ejemplos:

- 11. BaO₂ dióxido de bario (nombre estequiómetrico simple), o (dióxido) de bario, o dióxido(2–) de bario (especifica el anión diatómico), o peróxido de bario (usando el nombre alternativo del anión, aceptado por la IUPAC)
- 12. MnO₂ dióxido de manganeso (nombre estequiométrico sencillo), bis(óxido) de manganeso (especifica que hay dos iones óxido y no un anión diatómico), u óxido de manganeso(IV)

IR-5.5 NOMBRES DE LOS COMPUESTOS DE ADICIÓN

El término *compuestos de adición* comprende a los compuestos dador-aceptor (aductos) y a una variedad de compuestos reticulares. El método que se describe aquí, sin embargo, es relevante no sólo para dichos compuestos sino también para las sales múltiples y para algunos compuestos de estructura incierta o para los que no es necesario comunicar su estructura completa.

Los nombres de cada uno de los componentes individuales de un compuesto de adición generalizado se construyen mediante el sistema de nomenclatura apropiado, ya sea de composición, de sustitución o de adición. El nombre completo del compuesto se forma conectando los nombres de los componentes con guiones extralargos ('em'); las proporciones de los componentes se indican después del nombre por medio de un descriptor estequiométrico que está formado por números arábigos separados por una barra o barras. El descriptor, que se coloca entre paréntesis, está separado del nombre del compuesto por un espacio. El orden de los nombres de los componentes individuales es, primero, según el número creciente de los componentes y, segundo, el alfabético. Como única excepción, el nombre del componente agua se cita el último. Obsérvese que esto significa un cambio respecto de la regla de la referencia 2, según la cual los nombres de los componentes deben seguir el orden dado por la fórmula. Los números en el descriptor siguen el mismo orden que los nombres de los componentes correspondientes.

El nombre de clase 'hidratos' es aceptado por la IUPAC para los compuestos de adición que contienen agua como componente debido a su uso generalizado, si bien, la desinencia '-ato' podría parecer que indica un componente aniónico. Los nombres 'hidrato' de tipo clásico son aceptado por la IUPACs para los hidratos de estequiometría sencilla, pero no se han formulado reglas para estequiometrías no-enteras, como la del ejemplo 12 de más adelante. También, los términos 'deuterato' y 'tritiato' para los compuestos de adición de ²H₂O y ³H₂O u otras especies acuosas modificadas isotópicamente, no son aceptados por la IUPAC por su ambigüedad. El ejemplo 3 muestra una fórmula y el nombre de un compuesto de dicho tipo con modificación isotópica. En tal caso, la fórmula del componente modificado se representa según las reglas de la Sección IR-2.3.3 de la referencia 3.

Ejemplos:

1. $BF_3 \cdot 2H_2O$ trifluoruro de boro—agua (1/2)

2. 8Kr·46H₂O kriptón—agua (8/46)

3. 8Kr·46³H₂O kriptón—(³H₂)agua (8/46)

4.	$CaCl_2 \cdot 8NH_3$	cloruro de calcio—amoníaco (1/8)
5.	AlCl ₃ ·4EtOH	cloruro de aluminio—etanol (1/4)
6.	BiCl ₃ ·3PCl ₅	cloruro de bismuto(III)—cloruro de fósforo(V) (1/3)
7.	$2Na_2CO_3 \cdot 3H_2O_2$	carbonato de sodio—peróxido de hidrógeno (2/3)
8.	$Co_2O_3 \cdot nH_2O$	óxido de cobalto(III)—agua (1/n)
9.	$Na_2SO_4 \cdot 10H_2O$	sulfato de sodio—agua (1/10)
10.	$Al_2(SO_4)_3{\cdot}K_2SO_4{\cdot}24H_2O$	sulfato de aluminio—sulfato de potasio—agua (1/1/24)
11.	$AlK(SO_4)_2 \cdot 12H_2O$	bis(sulfato) de aluminio y potasio dodecahidrato
12.	3CdSO ₄ ⋅8H ₂ O	sulfato de cadmio—agua (3/8)

No hay diferencia entre los complejos dador-aceptor y los complejos de coordinación desde el punto de vista de la nomenclatura. En este sentido, a dichos sistemas puede dársele un nombre de adición del tipo descrito en las Secciones IR-7.1 a IR-7.3 y en el Capítulo IR-9.

Ejemplo:

13.
$$BH_3 \cdot (C_2H_5)_2O$$
 o $[B\{(C_2H_5)_2O\}H_3]$ borano—etoxietano (1/1), o (etoxietano)trihidruroboro

Una nomenclatura de complejos orgánicos dador-aceptor ligeramente diferente se presenta en la Sección P.68.1 de la referencia 4.

IR-5.6 RESUMEN

Los nombres de composición son o de tipo estequiométrico (los cuales, a su vez, son de tipo binario excepto el caso de especies homoatómicas) o de tipo compuesto de adición. La nomenclatura de composición se utiliza cuando el nombre vaya a expresar una información estructural escasa o nula. No obstante, pueden usarse las nomenclaturas de sustitución y de adición para indicar la estructura de los constituyentes de un compuesto que se nombra en conjunto por medio de la nomenclatura de composición. La nomenclatura de sustitución se describe en el Capítulo IR-6 y la nomenclatura de adición en los Capítulos IR-7, IR-8 e IR-9.

IR-5.7 REFERENCIAS

- 1. Names for Organic Radicals, Pure Appl. Chem., 72, 437–446 (2000).
- 2. Nomenclature of Inorganic Chemistry, IUPAC Recommendations 1990, G. J. Leigh (Ed.), Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1990.
- 3. Nomenclature of Inorganic Chemistry II, IUPAC Recommendations 2000, J. A. McCleverty y N. G. Connelly (Eds.), Royal Society of Chemistry, 2001.
- 4. *Nomenclature of Organic Chemistry, IUPAC Recommendations*, W. H. Powell y H. Favre (Eds.), Royal Society of Chemistry, en preparación.

IR-6 Nombres de los hidruros progenitores y nomenclatura de sustitución

CONTENIDO

IR-6.5 Referencias

IR-6.1 Intro	ducción						
IR-6.2 Nom	bres de los hidruros progenitores						
IR-6.2.1	Hidruros progenitores mononucleares con números de enlaces normales e inusuales						
IR-6.2.2	Hidruros progenitores homopolinucleares (excepto los hidruros de boro y carbono)						
IR-6.2	2.1 Hidruros progenitores acíclicos homonucleares en los que todos sus átomos						
	presentan sus números de enlaces normales						
IR-6.2	2.2 Hidruros progenitores acíclicos homonucleares de elementos que exhiben						
	números de enlaces inusuales						
IR-6.2	2.3 Hidruros acíclicos homonucleares insaturados						
IR-6.2	2.4 Hidruros progenitores monocíclicos homonucleares						
IR-6.2	.2.5 Hidruros progenitores policíclicos homonucleares						
IR-6.2.3	Hidruros de boro						
IR-6.2	3.1 Nombres estequiométricos						
IR-6.2	1						
IR-6.2	1						
IR-6.2							
	Hidruros progenitores heteronucleares						
IR-6.2							
	4.2 Hidruros constituidos por cadenas de átomos alternantes en el esqueleto						
IR-6.2	.4.3 Hidruros progenitores monocíclicos heteronucleares; la nomenclatura de Hantzsch-Widman						
ID 6.2	4.4 Reemplazo en el esqueleto de los hidruros de boro						
IR-6.2	-						
	enclatura de sustitución de los derivados de los hidruros progenitores						
	Uso de sufijos y prefijos						
IR-6.3.2	Sustitución de átomos de hidrógeno en los hidruros de boro						
	bres de los iones y radicales derivados de los hidruros progenitores						
	Cationes derivados de los hidruros progenitores por adición de uno o más hidrones						
	Cationes derivados de los hidruros progenitores por pérdida de uno o más iones						
110 0.1.2	hidruro						
IR-6.4.3	Cationes sustituidos						
IR-6.4.4	Aniones derivados de los hidruros progenitores por pérdida de uno o más hidrones						
IR-6.4.5	Aniones derivados de los hidruros progenitores por adición de uno o más iones						
	hidruro						
IR-6.4.6	Aniones sustituidos						
IR-6.4.7	Radicales y grupos sustituyentes						
IR-6.4.8	Radicales sustituidos o grupos sustituyentes						
IR-6.4.9	Centros aniónicos y catiónicos y radicales en una molécula o ion						

IR-6.1 INTRODUCCIÓN

La *nomenclatura de sustitución* es un sistema en el que los nombres se basan en los de los *hidruros progenitores*, que definen una población normal de átomos de hidrógeno unidos a una estructura de esqueleto. Los nombres de los *derivados* de los hidruros progenitores se forman citando los prefijos o sufijos pertinentes de los *grupos sustituyentes* (o sustituyentes) que reemplazan a átomos de hidrógeno, precedidos por localizadores cuando sea necesario, y unidos sin separación al nombre del hidruro padre sin sustituir.

La nomenclatura de sustitución se recomienda solamente para los derivados de los hidruros progenitores cuyos nombres se encuentran en la Tabla IR-6.1 (Sección IR-6.2.1) y para los derivados de los hidruros polinucleares que contienen solamente estos elementos (véanse las Secciones IR-6.2.2–IR-6.2.4). Se sobreentiende que los números de enlaces de los átomos del esqueleto son los que se encuentran en la Tabla IR-6.1. Estos números de enlaces, v.g., 4 para el Si y 2 para el Se, se denominan *números de enlaces normales*. Cuando aparecen otros números de enlaces diferentes, tienen que indicarse con un designador adecuado (mediante el convenio λ , véanse la Sección IR-6.2.2.2 y la Sección P-14.1.3 de la referencia 1).

En general, se seguirán aquí los convenios y prácticas significativos de la nomenclatura de sustitución, tal como se aplica a los compuestos orgánicos.¹

La construcción de un nombre de sustitución implica, en general, el reemplazo de átomos de hidrógeno en una estructura progenitora por otros átomos o grupos de átomos. Otras operaciones relacionadas, que se consideran a menudo como parte de la nomenclatura de sustitución, son el *reemplazo en el esqueleto* (Sección IR-6.2.4.1) y el *reemplazo funcional* en los oxoácidos progenitores (Sección IR-8.6). Obsérvese que algunas operaciones en la nomenclatura basada en los hidruros progenitores no son operaciones de sustitución. Por ejemplo, la formación de aniones y cationes por adición de H⁻ y H⁺, respectivamente (Secciones IR-6.4.1 e IR-6.4.5). Los nombres que se forman mediante las modificaciones de los nombres de los hidruros progenitores descritas en esas secciones se consideran todavía que son parte de la nomenclatura de sustitución.

En la mayor parte de los casos, los compuestos nombrados por sustitución en el presente capítulo pueden nombrarse alternativamente y de modo igualmente sistemático por la nomenclatura de adición (Capítulo IR-7), pero es muy importante observar que dichos nombres de adición de los hidruros progenitores presentados aquí no pueden utilizarse como *nombres progenitores* en la nomenclatura de sustitución.

Los hidruros de boro neutros se llaman boranos. Los aspectos básicos de la nomenclatura de los boranos se encuentran en la Sección IR-6.2.3; los aspectos más avanzados se tratarán en una futura publicación de la IUPAC.

IR-6.2 NOMBRES DE LOS HIDRUROS PROGENITORES

IR-6.2.1 Hidruros progenitores mononucleares con números de enlaces normales e inusuales

Los hidruros mononucleares de los elementos de los grupos 13–17 de la tabla periódica juegan un papel central en la nomenclatura de sustitución. Éstos se usan como hidruros progenitores, como se indicó anteriormente, con los nombres progenitores dados en la Tabla IR-6.1.

En los casos en que el número de enlaces difiera del número normal definido anteriormente, tiene que indicarse esta particularidad en el nombre del hidruro mediante un superíndice adecuado unido a la letra griega λ y separados del nombre de la Tabla IR-6.1 por un guión.

Ejemplos:

1. PH_5 λ^5 -fosfano 2. PH λ^1 -fosfano 3. SH_6 λ^6 -sulfano 4. SnH_2 λ^2 -estannano

IR-6.2.2 Hidruros progenitores mononucleares (excepto los hidruros de boro y carbono)

IR-6.2.2.1 Hidruros progenitores acíclicos homonucleares en los que todos sus átomos presentan sus números de enlaces normales

Los nombres se construyen añadiendo el prefijo multiplicador apropiado ('di', 'tri', 'tetra', etc., véase la Tabla IV*), que corresponde al número de átomos de la cadena unidos en serie, delante del nombre del hidruro mononuclear correspondiente, que finaliza en '-ano', de la Tabla IR-6.1.

Ejemplos:

1. HOOH dioxidano, o peróxido de hidrógeno

2. H₂NNH₂ diazano, o hidrazina

3. H₂PPH₂ difosfano

4. H₃SnSnH₃ diestannano

5. HSeSeSeH triselano

6. H₃SiSiH₂SiH₂SiH₃ tetrasilano

El nombre de composición 'peróxido de hidrógeno' (compárese con el Capítulo IR-5) es una alternativa a 'dioxidano' para H₂O₂, pero no es válido como nombre de hidruro progenitor en la nomenclatura de sustitución. En la Sección P-68.3. de la referencia 1, los derivados orgánicos de H₂NNH₂ se nombran usando 'hidrazina' como nombre progenitor.

IR-6.2.2.2 Hidruros progenitores acíclicos homonucleares de elementos que exhiben números de enlaces inusuales

En los casos en que los átomos de esqueleto de un hidruro en cadena sean iguales, pero uno o más de ellos tiene un número de enlaces diferente de los valores estándar definidos en la Tabla IR-6.1, el nombre del hidruro se forma como si todos los átomos tuvieran números de enlaces normales. Sin embargo, dicho nombre va precedido de localizadores, uno para cada átomo anómalo, y a cada localizador le sigue, sin dejar espacio, λ^n , siendo n el número de enlaces pertinente.

Cuando hay que optar entre átomos de esqueleto iguales con distintos estados de valencia, se prefiere asignar el localizador más pequeño al átomo cuyo estado de valencia es inusual. Si después hubiera que elegir entre átomos del esqueleto iguales con dos o más estados de valencia inusuales, se asigna el localizador o localizadores menores en el orden del valor numérico decreciente del número de enlaces, es decir, λ^6 tiene preferencia sobre λ^4 .

⁻

^{*} Las Tablas numeradas con números romanos se recogen juntas al final de este libro.

Tabla IR-6.1 Nombres progenitores de los hidruros mononucleares

BH_3	borano	CH_4	metano, ^a	NH_3	azano, ^b	H_2O	oxidano, b,c	HF	fluorano, d
AlH_3	alumano, ^c	SiH_4	silano	PH_3	fosfano, ^e	H_2S	sulfano, c,f	HCl	clorano,d
GaH_3	galano	GeH_4	germano	AsH_3	arsano, ^e	H_2Se	selano, c,f	HBr	bromano, ^d
InH_3	indigano, ^g	SnH_4	estannano	SbH_3	estibano, e	H_2Te	telano, c,f	HI	yodano, ^d
TlH_3	talano	PbH_4	plumbano	BiH_3	bismutano, ^c	H_2Po	polano, c,f	HAt	astatano, ^d

^a El nombre sistemático análogo es 'carbano'. Puesto que el nombre 'metano' para CH₄ es de uso universal, no se recomienda 'carbano'.

b Los nombres 'azano' y 'oxidano' se proponen con la intención de usarlos solamente para nombrar derivados del amoniaco y agua, respectivamente, mediante la nomenclatura de sustitución y son la base para nombrar las entidades polinucleares (v.g., triazano, dioxidano). Pueden encontrarse ejemplos de ese uso en la Sección IR-6.4 y en la Tabla IX. Muchos derivados orgánicos del amoniaco se nombran tomando como base los sufijos de grupo sustituyente 'amina' e 'imina' en la Sección P-62 de la referencia 1.

^c No se pueden usar los nombres aluminano, bismano, oxano, tiano, selenano, telurano y polonano porque son los nombres de los anillos heteromonocíclicos saturados de seis eslabones en el sistema de Hantzsch-Widman (véase la Sección IR-6.2.4.3). El nombre 'alano', que se ha utilizado para AlH₃, debe descartarse porque el nombre derivado sistemáticamente del grupo sustituyente –AlH₂ sería 'alanil', el cual está reconocido como el nombre del grupo acilo derivado del aminoácido alanina.

d Los nombres 'fluorano', 'clorano', 'yodano' y 'astatano' se incluyen aquí porque son las bases para la formación de los nombres de sustitución de iones, radicales y grupos sustituyentes (véanse IR-6.4.7 y la Tabla IX para encontrar ejemplos). Los hidruros sin sustituir pueden llamarse también 'fluoruro de hidrógeno', 'bromuro de hidrógeno', etc. (nomenclatura de composición, Capítulo IR-5). Sin embargo, estos nombres de composición no se pueden utilizar como nombres progenitores.

^e Los nombres sistemáticos 'fosfano', 'arsano' y 'estibano' se utilizan ampliamente en este libro. Ya no son aceptables los nombres 'fosfina', 'arsina ' y 'estibina'.

f Sulfano, cuando esté sin sustituir puede llamarse también 'sulfuro de hidrógeno', o mejor, 'sulfuro de dihidrógeno' (nomenclatura de composición, Capítulo IR-5). Sin embargo, un nombre de composición no se puede utilizar como un nombre progenitor. Las observaciones equivalentes se aplican a selano, telano y polano.

g El nombre sistemático análogo de InH₃ debería ser 'indano', el cual está, por otra parte, admitido tradicionalmente como el del hidrocarburo 2,3-dihidroindeno. El nombre 'indiano' conduciría a la confusión al nombrar sus derivados insaturados, v.g., 'triindieno', lo que podría referirse a un compuesto con dos enlaces dobles (un dieno) y también al derivado monoinsaturado del triindiano. El nombre progenitor 'indigano' procede de la fuente etimológica 'índigo', que es el color a la llama del indio.

Ejemplos:

1 2 3 4
1.
$$H_5SSSH_4SH$$
 $1\lambda^6$, $3\lambda^6$ -tetrasulfano (no es $2\lambda^6$, $4\lambda^6$)
1 2 3 4 5
2. $HSSH_4SH_4SH_2SH$ $2\lambda^6$, $3\lambda^6$, $4\lambda^4$ -pentasulfano (no es $2\lambda^4$, $3\lambda^6$, $4\lambda^6$)
3. $H_4PPH_3PH_3PH_4$ $1\lambda^5$, $2\lambda^5$, $3\lambda^5$, $4\lambda^5$ -tetrafosfano
4. $HPbPbPbH$ $1\lambda^2$, $2\lambda^2$, $3\lambda^2$ -triplumbano

IR-6.2.2.3 Hidruros acíclicos homonucleares insaturados

Las cadenas que contienen insaturaciones encajan en la nomenclatura de sustitución mediante los mismos métodos usados para alquenos y alquinos orgánicos (véase la Sección P-31.1 de la referencia 1), es decir, se modifica el nombre del hidruro en cadena saturado correspondiente reemplazando la desinencia '-ano' por '-eno' en el caso de un enlace doble y por '-ino' en el caso de un enlace triple. Si hubiera uno de cada tipo, el sufijo resultante es '-en'...'-ino' con los localizadores adecuados; si hubiera dos enlaces dobles se usaría '-dieno' y así sucesivamente. En cada caso, las posiciones de las insaturaciones se indican por medio de localizadores numéricos que preceden inmediatamente a los sufijos. Los localizadores se eligen de manera que sean los más bajos posibles.

Ejemplos:

```
    HN=NH diazeno
    HSb=SbH diestibeno
    1 2 3 4 5
        H<sub>2</sub>NN=NHNNH<sub>2</sub> pentaaz-2-eno (no es pentaaz-3-eno)
```

Los hidruros acíclicos insaturados no están clasificados como hidruros progenitores. Debido a las reglas jerárquicas de la nomenclatura de sustitución, la numeración de los enlaces dobles y triples puede quedar sin determinar mientras no se hayan numerado varios grupos y modificaciones de mayor prioridad. (Véase la Sección IR-6.4.9 como ejemplo)

IR-6.2.2.4 Hidruros progenitores monocíclicos homonucleares

Hay tres métodos importantes de nombrar los hidruros progenitores monocíclicos homonucleares:

- (i) usando la nomenclatura de Hantzsch-Widman (H-W) (véanse la Sección IR-6.2.4.3 y la Sección P-22.2.2 de la referencia 1);
- (ii) usando el prefijo de reemplazo relevante (el término en 'a') de la Tabla X, junto con el prefijo multiplicador pertinente para indicar el reemplazo de átomos de carbono en el nombre del compuesto carbocíclico correspondiente. (véase la Sección P-22.2 de la referencia 1).
- (iii) añadiendo el prefijo 'ciclo' al nombre de la correspondiente cadena sin ramificaciones y no sustituida (véanse las Secciones IR-6.2.2.1 IR-6.2.2.3 y la Sección P-22.2 de la referencia 1).

Los tres métodos se usan en los ejemplos 1–4 siguientes. El nombre de Hantzsch-Widman se prefiere para nombrar los derivados orgánicos de hidruros progenitores monocíclicos homonucleares con anillos sin carbono de 3 a 10 eslabones. Para anillos más grandes se prefieren

los nombres que proporciona el segundo método. Véase la Sección P-22.2 de la referencia 1 para encontrar las reglas más detalladas sobre hidruros progenitores de ciclos grandes.

Ejemplos:

1.

- (i) nombre de H-W: pentaazolidina
- (ii) pentaazaciclopentano
- (iii) ciclopentaazano

2.

- (i) nombre de H-W: octasilocano
- (i) octasilaciclooctano
- (iii) ciclooctasilano

3.

- (i) nombre de H-W: 1H-trigermireno
- (ii) trigermaciclopropeno
- (iii) ciclotrigermeno

4.

(i) nombre de H-W: 1H-pentazol

- (ii) pentaazaciclopenta-1,3-dieno
- (iii) ciclopentaaza-1,3-dieno

Obsérvese que en el ejemplo 4 la numeración del nombre de H-W difiere de la de los otros dos métodos; las prioridades de H-W dependen de la posición del átomo de hidrógeno y las de (ii) y (iii)

de las localizaciones de los enlaces dobles.

IR-6.2.2.5 Hidruros progenitores policíclicos homonucleares

Los nombres progenitores de los policiclos homonucleares pueden construirse por los tres siguientes métodos:

- (i) especificando la fusión de los monociclos pertinentes (Sección P-25.3 de la referencia 1), nombrados cada uno de ellos por el sistema de Hantzsch-Widman (véase la Sección IR-6.2.4.3);
- (ii) usando un prefijo de reemplazo en el esqueleto (el término en 'a') de la Tabla X, junto con el prefijo multiplicador pertinente para indicar el reemplazo de átomos de carbono en el correspondiente compuesto carbocíclico.
- (iii) especificando la estructura del ciclo mediante la notación de von Baeyer (Sección P-23.4 de la referencia 1) en conjunción con el nombre del hidruro lineal correspondiente, tal como se derivó en la Sección IR-6.2.2.1.

Ejemplos:

1.

- (i) hexasilinohexasilino
- (ii) decasilanaftaleno

2.

- (ii) y (iii) decasilabiciclo [4.4.0] decano
- (iii) biciclo[4.4.0]decasilano

IR-6.2.3 **Hidruros de boro**

IR-6.2.3.1 Nombres estequiométricos

Los hidruros de poliboro neutros se llaman boranos y la estructura progenitora más sencilla, BH₃, recibe el nombre de 'borano'. El número de átomos de boro en una molécula de hidruro de boro se indica con un prefijo multiplicador. La diferencia principal entre este sistema de nomenclatura y el de hidrocarburos es que aquí tiene que definirse el número de átomos de hidrógeno, puesto que no puede deducirse de consideraciones de enlace sencillas. El número de átomos de hidrógeno se indica con el número arábigo apropiado, encerrado entre paréntesis y que sigue inmediatamente al nombre. Este tipo de nombres expresa solamente información sobre la composición.

Ejemplos:

1. B_2H_6 diborano(6)

2. $B_{20}H_{16}$ icosaborano(16)

IR-6.2.3.2 Nombres con descriptores estructurales

Al aumentar el nombre estequiométrico con un descriptor estructural se obtiene mayor información. El descriptor se basa en las relaciones del cómputo de electrones² y se presenta en la Tabla IR-6.2.

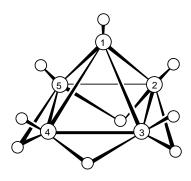
Tabla IR-6.2. Resumen de los tipos de estructuras de hidruros de boro habituales según la estequiometría y las relaciones del cómputo de electrones^a

Descriptor	Pares de electrones esqueletales	Hidruro progenitor	Descripción de la estructura
closo	n+1	B_nH_{n+2}	Estructura poliédrica cerrada de caras triangulares
nido	n+2	B_nH_{n+4}	Estructura poliédrica sin cerrar con forma de nido; ocupados n vértices
			del poliedro <i>closo</i> progenitor de (n+1) átomos.
aracno	n+3	B_nH_{n+6}	Estructura poliédrica abierta con forma de telaraña; ocupados n
			vértices del poliedro <i>closo</i> progenitor de (<i>n</i> +2) átomos
hifo	n+4	B_nH_{n+8}	Estructura poliédrica abierta con forma de red; ocupados n vértices del
			poliedro $closo$ progenitor de $(n+3)$ átomos.
klado	n+5	B_nH_{n+10}	Estructura poliédrica abierta con forma de ramas; ocupados n vértices
			del poliedro <i>closo</i> progenitor de (<i>n</i> +4) átomos.

^a Las relaciones estructurales se representan a menudo por un diagrama de Rudolph.³

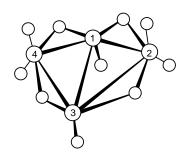
Ejemplos:

1.



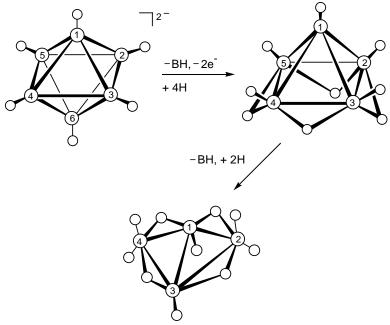
nido-pentaborano(9), B₅H₉

2.



aracno-tetraborano(10), B₄H₁₀

Las dos estructuras de los ejemplos 1 y 2 pueden considerarse relacionadas con las de closo- $B_6H_6^{2-}$ como sigue:



Las estructuras se obtienen formalmente por eliminación de uno (ejemplo 1), o dos (ejemplo 2) grupos BH y la adición del número de átomos de hidrógeno pertinente.

Debe observarse que los prefijos *nido*, *aracno*, etc. no se usan para los boranos más sencillos, cuya derivación formal de las estructuras progenitoras *closo* por sustracciones sucesivas puede parecer forzada.

Los compuestos en cadena se pueden identificar explícitamente utilizando el prefijo 'catena'.

Ejemplos:

3.

4. H₂BBHBH₂ catena-triborano(5)

5. HB=BBH₂ catena-triboreno(3)

Para compuestos cíclicos, pueden usarse el prefijo 'ciclo' unido al del correspondiente compuesto en cadena o el sistema de nomenclatura de Hantzsch-Widman (H-W) (compárese con la Sección IR-6.2.4.3).

Ejemplo:

6.

ciclotetraborano nombre de H-W: tetraboretano

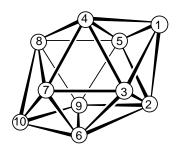
IR-6.2.3.3 Numeración sistemática de los clústeres poliédricos

Es necesario numerar sistemáticamente el esqueleto de boro de cada clúster, de modo que permita designar sin ambigüedad sus derivados sustituidos. Con este fin, se considera que los átomos de boro de las estructuras *closo* ocupan planos dispuestos secuencialmente y perpendiculares al eje de simetría de mayor orden. Si hubiera dos de estos ejes, se elige el 'más largo', entendido como el que atraviesa al mayor número de planos perpendiculares.

La numeración comienza en el átomo de boro más próximo al espectador cuando se mira el clúster a lo largo de este eje y prosigue, ya sea en el sentido horario o contrario a las agujas del reloj (antihorario), con todos los átomos del esqueleto del primer plano. Después, la numeración continúa en el mismo sentido con los átomos del siguiente plano, comenzando por el átomo de boro más próximo al que tiene el número menor en el plano precedente al avanzar en la dirección de la numeración.

Ejemplo:

1.

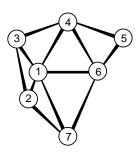


closo-B₁₀H₁₀²⁻ (se han omitido los átomos de hidrógeno para mayor claridad)

La numeración de los clústeres *nido* se deriva de la estructura del clúster *closo* relacionado. En el caso de los clústeres *aracno* y más abiertos, la abertura se presenta hacia el observador y se considera que los átomos de boro están proyectados sobre un plano colocado detrás. Entonces, se numeran secuencialmente por zonas, comenzando por el átomo de boro central de mayor conectividad y se prosigue en sentido horario o antihorario hasta completar la zona más interna. A continuación, se numera en el mismo sentido la siguiente zona, comenzando por la posición de las 12 horas y así sucesivamente hasta completar la zona más externa. Este tratamiento implica que es improbable que la numeración de un borano *closo* progenitor pueda mantenerse en la del sistema *aracno* correspondiente.

Ejemplo:

2.



aracno-B₇H₁₃ (se han omitido los átomos de hidrógeno para mayor claridad)

Cuando haya una alternativa posible, la molécula se orienta de manera que la posición de las 12 horas se decide aplicando consecutivamente y en orden los siguientes criterios:

- (i) La posición de las 12 horas se encuentra en un plano de simetría que contiene el mínimo número posible de átomos de boro;
- (ii) la posición de las 12 horas se encuentra en la parte del plano de simetría que contiene el mayor número de átomos de esqueleto;
- (iii) la posición de las 12 horas se encuentra opuesta al mayor número de átomos puente.

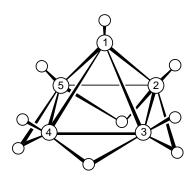
El uso de los criterios (i)-(iii) puede ser insuficiente para tomar una decisión y, evidentemente, resultan inaplicables si no hay un plano de simetría. En dichos casos se usan los principios generales de la nomenclatura orgánica, como la elección de un esquema de numeración que dé los localizadores menores a los átomos sustituidos.

IR-6.2.3.4 Nomenclatura sistemática con la distribución de los átomos de hidrógeno

Puede suponerse que en los boranos abiertos cada átomo de boro lleva al menos un átomo de hidrógeno terminal. Sin embargo, es necesario especificar las posiciones de los hidrógenos puente, lo que se logra usando el símbolo μ precedido de los localizadores de las posiciones esqueletales del puente en orden numérico ascendente. En el nombre se utiliza el indicador H para los átomos de hidrógeno puente.

Ejemplo:

1.



2,3:2,5:3,4:4,5-tetra-µ*H-nido*-pentaborano(9)

Este procedimiento para localizar los átomos de hidrógeno puente es una adaptación del método del 'hidrógeno indicado' de la nomenclatura orgánica (véase la Sección P-14.6 de la referencia 1). El método del 'hidrógeno indicado' daría el nombre (2,3-μH),(2,5-μH),(3,4-μH),(4,5-μH)-nido-pentaborano(9).

IR-6.2.4 Hidruros progenitores heteronucleares

IR-6.2.4.1 Hidruros progenitores acíclicos heteronucleares: generalidades

Cuando se reemplazan al menos cuatro átomos de carbono de un hidrocarburo progenitor de cadena sin ramificaciones por heteroátomos, iguales o diferentes, y los átomos de carbono terminales o permanecen o son reemplazados por P, As, Sb, Bi, Si, Ge, Sn, Pb, B, Al, Ga, In, o Tl, puede utilizarse la *nomenclatura de reemplazo en el esqueleto* (la nomenclatura en 'a') para indicar los heteroátomos (véanse las Secciones P-15.4 y P-21.2 de la referencia 1).

En este método, se nombra primero la cadena como si estuviera constituida completamente por átomos de carbono. A continuación, se designan los heteroátomos de la cadena mediante los

prefijos de reemplazo pertinentes (los términos en 'a') de la Tabla X, citados en el orden de prioridad indicado en la Tabla VI y precedido cada uno por su correspondiente localizador. Los localizadores se asignan numerando la cadena desde el extremo que dé los menores localizadores a los heteroátomos, tomándose éstos como un conjunto. Si fueran iguales, se numera desde el extremo que dé el localizador o conjunto de localizadores más bajo al prefijo de reemplazo citado en primer lugar. Si todavía subsiste alguna posibilidad de elección, se asignan los localizadores más pequeños a las posiciones con insaturación.

Los nombres progenitores construidos de esta manera se dan solamente a cadenas de cuatro o más heteroátomos –cuatro o más heterounidades hablando estrictamente—. Una heterounidad es una secuencia de heteroátomos que es, en sí misma, el esqueleto de un hidruro progenitor, v.g., Se y SS y SiOSi (véase la Sección IR-6.2.4.2), pero no lo es OSiO. Cuando se cuentan con este fin, los heteroátomos no pueden pertenecer al grupo característico principal, si hubiera alguno (véase la Sección IR-6.3.1). Las cadenas heteronucleares con menos heterounidades y aquellas que no tienen en los extremos alguno de los átomos referidos anteriormente se nombran por sustitución como derivados de hidruros progenitores homonucleares y ellas mismas no se usan como progenitores.

Ejemplos:

1.
$$H_2N$$
 N NH_2

N-(2-aminoetil)etano-1,2-diamina

N,N'-bis(2-aminoetil)etano-1,2-diamina

7,10-dioxa-2-tia-4-silaundecano

(Nombre del progenitor. Obsérvese que el nombre no es 2,5-dioxa-10-tia-8-silaundecano, porque el conjunto localizador 2,4,7,10 tiene prioridad sobre el conjunto localizador 2,5,8,10).

Los nombres no ambiguos de cadenas heteronucleares que no contienen carbono pueden derivarse de un hidrocarburo progenitor o de un progenitor de cadena homonuclear sin carbono (compárese con la Sección IR- 6.2.2.1). Alternativamente, las cadenas heteronucleares pueden nombrarse por adición según el método descrito en la Sección IR-7.4. Sin embargo, estos nombres no se pueden utilizar como nombres progenitores en la nomenclatura de sustitución.

Ejemplo:

1,2,3,5-tetrasila-4-germapentano (*no es* 1,3,4,5-tetrasila-2-germapentano), o 2-germapentasilano (obsérvese que éste se basa en una numeración diferente), o 1,1,1,2,2,3,3,4,4,5,5,5-dodecahidruro-4-germi-1,2,3,5-tetrasili-[5]catena

IR-6.2.4.2 Hidruros constituidos por cadenas de átomos alternantes en el esqueleto

Los hidruros cuya cadena consiste en átomos de dos elementos A y E que se alternan y ninguno de ellos es carbono, es decir, de secuencias (AE)nA, donde el elemento A aparece en segundo lugar en la secuencia de la Tabla VI, se nombran citando sucesivamente las siguientes partes del nombre:

- (i) un prefijo multiplicador (Tabla IV), que indica el número de átomos del elemento A, sin elidir la vocal terminal de este prefijo;
- (ii) los prefijos de reemplazo que finalizan en 'a' (Tabla X) que designan a los elementos A y E, citados en ese orden (eliminando la '-a' terminal del prefijo de reemplazo si está antes de otra 'a' u 'o').
- (iii) La desinencia '-no'.

Ejemplos:

SnH₃OSnH₂OSnH₂OSnH₃ tetraestannoxano
 SiH₃SSiH₂SSiH₂SSiH₃ tetrasilatiano
 PH₂NHPHNHPH₂ trifosfazano
 SiH₃NHSiH₃ disilazano

5. 1 2 3 4 5 6 7 $PH_2N=PNHPHNHPH_2$ tetrafosfaz-2-eno

Las cuatro primeras estructuras son hidruros progenitores, pero no lo es el compuesto insaturado (véanse las notas de la Sección IR-6.2.2.3).

IR-6.2.4.3 Hidruros progenitores monocíclicos heteronucleares; nomenclatura de Hantzsch-Widman

Existen dos sistemas de nomenclatura generales e incluso una tercera posibilidad en algunos casos.

(i) En el sistema de Hantzsch-Widman (H-W) generalizado (Sección P-22.2 de la referencia 1), los nombres se construyen de modo que expresan el tamaño del ciclo, la presencia de heteroátomos (es decir, cualquiera excepto el carbono) y el grado de hidrogenación –ya sea *mancude* (es decir, con el máximo número de enlaces dobles no acumulados) o saturado– por medio de prefijos y desinencias características. Las desinencias se encuentran en la Tabla IR-6.3. Los hidruros con grados de hidrogenación intermedios se nombran mediante el prefijo 'hidro', junto con el prefijo multiplicador adecuado. Sin embargo, dichos hidruros no son progenitores.

El orden de citación de los heteroátomos sigue el de la Tabla VI, es decir, F > Cl > Br > I > O >etc., donde ' > ' significa 'que se cita antes'. Los localizadores se asignan a los heteroátomos de manera que, primordialmente, se asegure que el localizador '1' se asigna al átomo que se cita en primer lugar, y después, que el conjunto total de localizadores sea el más bajo posible y coherente con la numeración secuencial de las posiciones del ciclo (ordenando los conjuntos de localizadores de forma alfanumérica). Los heteroátomos se citan mediante los prefijos de reemplazo (los términos en 'a') de la Tabla X, junto con sus prefijos multiplicadores adecuados. Las excepciones en el sistema de Hantzsch-Widman son los términos en 'a' del aluminio e indio, 'aluma' e 'indiga'. En el caso de ciclos de seis miembros, el heteroátomo del anillo que se cita el último determina la elección de la desinencia entre las

alternativas de la Tabla IR-6.3.

Los tautómeros se distinguen mediante el uso del 'hidrógeno indicado' para especificar la localización del, o de los átomos de hidrógeno, que pueden colocarse en diferentes posiciones y, por tanto, la localización indirectamente del o de los enlaces dobles, como en el ejemplo 2 que sigue a continuación.

- (ii) Alternativamente, el nombre se basa en el del carbociclo correspondiente y los heteroátomos se indican mediante los prefijos de reemplazo (los términos en 'a') de la Tabla X, junto con los prefijos multiplicadores que correspondan. El orden de citación lo da, de nuevo, la Tabla VI.
- (iii) En el caso especial de ciclos saturados con dos átomos de esqueleto que alternan (como en los ejemplos 3–8 siguientes), el nombre puede construirse utilizando el prefijo 'ciclo' seguido de los prefijos de reemplazo (Tabla X) citados en el orden *inverso* al que aparecen los elementos correspondientes en la Tabla VI. El nombre finaliza en '-*ano*'.

Los nombres de Hantzsch-Widman son los preferidos en nomenclatura orgánica para ciclos de hasta 10 miembros. Para ciclos saturados y *mancude* (anillos con el máximo número de enlaces dobles no acumulados) con más de 10 eslabones se usa el método (ii). En la Sección P-22.2 de la referencia 1 se encuentran reglas más detalladas sobre hidruros progenitores de anillos grandes.

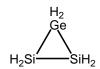
Tabla IR-6.3 Desinencias en el sistema de Hantzsch-Widman

Número de átomos en el ciclo	Mancude ^a	Saturado
3	ireno ('irina' para ciclos con	irano ('iridina' para ciclos con N)
	N como único heteroátomo)	
4	eto	etano ('etidina' para ciclos con N)
5	ol	olano ('olidina' para ciclos con N)
$6(A)^b$	ino	ano
$6(B)^b$	ino	inano
6(C) ^b	inino	inano
7	epino	epano
8	ocino	ocano
9	onino	onano
10	ecino	ecano

^a Maximo número de enlaces dobles no acumulados

Ejemplos:

1.



(i) nombre de H-W: disilagermirano

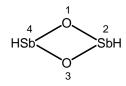
(ii) disilagermaciclopropano

^b 6(A) se usa cuando el heteroátomo citado en el último lugar es: O, S, Se, Te, Po, o Bi; 6(B) se usa cuando el heteroátomo citado el último es: N, Si, Ge, Sn, o Pb; 6(C) se usa cuando el heteroátomo citado el último es: F, Cl, Br, I, P, As, Sb, B, Al, Ga, In, o Tl.

2.

nombres de H-W: 3H-1,2,3-disilagermireno (a), 1H-1,2,3-disilagermireno (b)

3.



- (i) nombre de H-W: 1,3,2,4-dioxadiestibetano
- (ii) 1,3-dioxa-2,4-diestibaciclobutano
- (iii) ciclodiestiboxano

4.

- (i) nombre de H-W: 1,3,5,2,4,6-triazatriborinano
- (ii) 1,3,5-triaza-2,4,6-triboraciclohexano
- (iii) ciclotriborazano

5.

- (i) nombre de H-W: 1,3,5,2,4,6-trioxatriborinano
- (ii) 1,3,5-trioxa-2,4,6-triboraciclohexano
- (iii) ciclotriboroxano

6.

- (i) nombre de H-W: 1,3,5,2,4,6-tritiatriborinano
- (ii) 1,3,5-tritia-2,4,6-triboraciclohexano
- (iii) ciclotriboratiano

Los nombres borazol, boroxol y bortiol para los tres compuestos de los ejemplos 4, 5 y 6, respectivamente, se abandonaron hace tiempo porque denotan anillos de cinco miembros en el sistema de Hantzsh-Widman. Los nombres borazina, boroxina y bortiina indican ciclos insaturados de seis eslabones con un átomo de boro y uno de otro heteroátomo solamente –aunque el orden en que están colocados los nombres de los elementos es incorrecto— y tampoco son aceptables.

Ejemplo:

7.
$$\begin{array}{c|c}
6 & \stackrel{1}{N} & \stackrel{2}{>} & \\
HSi & \stackrel{1}{N} & \stackrel{2}{>} & \\
\parallel & & \parallel & \\
N & 5 & \stackrel{4}{>} & \stackrel{N}{>} & \\
1 & & & 1
\end{array}$$

(i) nombre de H-W: 1,3,5,2,4,6-triazatrisilino

(ii) 1,3,5-triaza-2,4,6-trisilaciclohexa-1,3,5-trieno

Cuando los átomos del ciclo tienen una conectividad diferente de sus números de enlaces normales (véase la Sección IR-6.2.1), el número de enlaces real se expresa mediante un numero arábigo como superíndice de la letra griega lambda colocada inmediatamente después de un localizador adecuado.

Ejemplo:

8.

$$\begin{array}{c|c}
 & 1 & 2 \\
 & N & PH_2 \\
 & \parallel & \parallel \\
 & N & M_3 \\
 & M_2 & M_3
\end{array}$$

(i) nombre de H-W: $1,3,5,2\lambda^5,4\lambda^5,6\lambda^5$ -triazatrifosfinino

(ii) 1,3,5-triaza- $2\lambda^5$, $4\lambda^5$, $6\lambda^5$ -trifosfaciclohexa-1,3,5-trieno

IR-6.2.4.4 Reemplazo en el esqueleto de los hidruros de boro

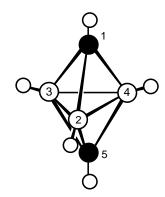
La estructura del esqueleto esencial de los hidruros de boro puede mantenerse en los derivados en los que uno o más átomos de boro se han reemplazado por otros átomos. Los nombres de dichas especies se forman mediante una adaptación de la nomenclatura de reemplazo y da lugar a los carbaboranos, azaboranos, fosfaboranos, tiaboranos, etc.

En los heteroboranos, el número de vecinos más próximos al heteroátomo es variable, pudiendo ser 5, 6, 7, etc. Por tanto, en la adaptación de la nomenclatura de reemplazo a los poliboranos, la sustitución de un átomo de boro por otro átomo se indica en el nombre, junto con el número de átomos de hidrógeno en la estructura poliédrica resultante. Se retienen los prefijos *closo*, *nido*, *aracno*, etc., como se indicó anteriormente (Sección IR-6.2.3.2). Las posiciones de los heteroátomos intrusos en el armazón poliédrico se indican por medio de localizadores, que son el conjunto más bajo de números coherente con la numeración del poliborano progenitor. Si hubiera alternativas para la asignación de los localizadores dentro de un conjunto dado, la numeración más baja debe asignarse al primer elemento que se encuentra usando la Tabla VI.

La población real de átomos de hidrógeno del compuesto en cuestión (y no la del compuesto progenitor con el esqueleto de átomos de boro) se añade al final del nombre, como un número arábigo entre paréntesis. Este número se conserva cuando se sustituyen átomos de hidrógeno.

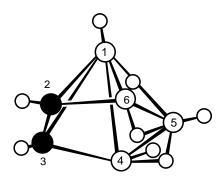
Ejemplos:

- 1. $B_{10}C_2H_{12}$ dicarba-closo-dodecaborano(12)
- 2. $B_3C_2H_5$



1,5-dicarba-*closo*-pentaborano(5)

3. $B_4C_2H_8$

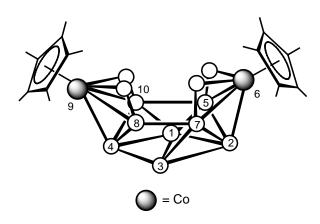


4,5:5,6-di-µ*H*-2,3-dicarba-*nido*-hexaborano(8)

Obsérvese que los localizadores del reemplazo en el esqueleto tienen prioridad sobre los de los usados para los átomos de hidrógeno puente. El número de átomos de hidrógeno puente es, en general, diferente en los heteroboranos respecto de los poliboranos progenitores y, a efectos de numeración, solamente se considera el esqueleto del borano progenitor.

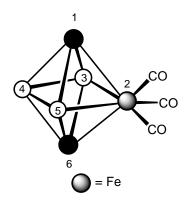
Ejemplos:

4.



6,9-bis(pentametil- η^5 -ciclopentadienil)-5,6:6,7:8,9:9,10-tetra- μH -6,9-dicobalta-nido-decaborano(12) (un hidrógeno terminal de cada átomo de boro se ha omitido para mayor claridad)

5.



2,2,2-tricarbonil-1,6-dicarba-2-ferra-*closo*-hexaborano(5) (un hidrógeno terminal de cada átomo de boro se ha omitido para mayor claridad)

IR-6.2.4.5 Hidruros progenitores policíclicos heteronucleares

Los nombres progenitores de los policiclos heteronucleares se pueden construir por tres métodos:

- (i) especificando la fusión de los monociclos relevantes (véase la sección P-25.3 de la referencia 1) nombrados por el sistema de Hantzsch-Widman (véase la Sección IR-6.2.4.3);
- (ii) usando los prefijos de reemplazo (términos en 'a') de la Tabla X para especificar la sustitución de átomos de carbono en el correspondiente compuesto carbocíclico. Los heteroátomos se citan en el orden determinado por la Tabla VI y se les añaden los prefijos multiplicadores apropiados;
- (iii) para los sistemas cíclicos constituidos por unidades repetidas, usando la notación de von Baeyer para especificar la estructura del anillo combinada con el prefijo multiplicador apropiado y los prefijos de reemplazo de la Tabla X apropiados de la unidad repetitiva; compárese con los nombres discutidos en la Sección IR-6.2.4.2.

Ejemplo:

1.

{La numeración se da sólo para el método (ii)}

(i): octahidro[1,3,5,2,4,6]triazatriborinino[1,3,5,2,4,6]triazatriborinino

(ii): octahidro-1,3,4a,6,8-pentaaza-2,4,5,7,8a-pentaboranaftaleno

(iii): biciclo[4.4.0]pentaborazano

En este ejemplo, los nombres (i) e (ii) necesitan el prefijo adicional 'octahidro' porque los hidruros progenitores disponibles para estas construcciones (triazatriborinino y naftaleno, respectivamente) son *mancude* (es decir, tienen el máximo número de enlaces dobles no acumulados).

IR-6.3 NOMENCLATURA DE SUSTITUCIÓN DE LOS DERIVADOS DE HIDRUROS PROGENITORES

IR-6.3.1 Uso de prefijos y sufijos

Los grupos sustituyentes (o sustituyentes), que se considere que reemplazan a átomos de hidrógeno en hidruros progenitores, se nombran usando los sufijos ('-ol', '-tiol', '-peroxol', 'ácido carboxílico', etc.) y prefijos ('hidroxi-', 'fosfanil-', 'bromo-', 'nitro-', etc.) adecuados. Los sufijos de sustitución están clasificados por rango en la Sección P-43 de la referencia 1. Los prefijos se encuentran en una amplia lista en el Apéndice 2 de la referencia 1. El caso de los sustituyentes que se forman por eliminación de uno o más átomos de hidrógeno en un hidruro progenitor se explica brevemente, con ejemplos, en la Sección IR-6.4.7 y los prefijos de muchos sustituyentes inorgánicos habituales se incluyen en la Tabla IX.

Algunos sustituyentes se citan siempre como prefijos, especialmente los átomos de los halógenos. De otro modo, el sustituyente de mayor rango (el grupo característico principal) se cita como sufijo y el resto de los sustituyentes como prefijos. Los prefijos se citan en orden alfabético, excepto 'hidro', delante del nombre del hidruro progenitor y se usan paréntesis para evitar ambigüedades.

Los prefijos multiplicadores indican la presencia de dos o más sustituyentes idénticos; si los sustituyentes están, a su vez, sustituidos, se usan los prefijos 'bis', 'tris', 'tetrakis', etc. En el caso de que un prefijo multiplicador finalice en 'a' y un sufijo que comience por una vocal, la 'a' se elide (véase el ejemplo 2 siguiente). La 'o' final del nombre de un hidruro progenitor se omite delante de un sufijo que comienza con una vocal (véanse los ejemplos 1 y 6 siguientes).

Cuando hay una alternativa de elección del hidruro progenitor entre los que se encuentran en la Tabla IR-6.1 (o los hidruros correspondientes con números de enlaces inusuales, Sección IR-6.2.2.2), el nombre se basa en el del hidruro progenitor del elemento que aparece en primer lugar en la secuencia: N, P, As, Sb, Bi, Si, Ge, Sn, Pb, B, Al, Ga, In, Tl, O, S, Se, Te, C, F, Cl, Br, I.

La exposición anterior es un breve resumen de los principios más importantes de la nomenclatura de sustitución. En la referencia 1 se desarrolla un sistema extenso de reglas para elegir un nombre entre los numerosos nombres de sustitución no-ambiguos que pueden construirse frecuentemente para los compuestos orgánicos. No se ha desarrollado un conjunto extenso de reglas equivalente al anterior para compuestos que no contienen carbono, en parte porque a muchos de esos compuestos se les pueden dar también nombres de adición (Capítulo IR-7) y, a menudo, se les otorgan.

Los siguientes ejemplos muestran los principios expuestos anteriormente. En algunos casos se ofrecen los nombres de adición a efectos de comparación.

1.	SiH ₃ OH	silanol
2.	Si(OH) ₄	silanotetrol (de sustitución), o tetrahidroxidosilicio (de adición)
3.	SiF ₆	hexafluoro-λ ⁶ -sulfano (de adición), o hexafluoruroazufre (de adición)
4.	TlH ₂ CN	talanocarbonitrilo (de sustitución), o cianurodihidrurotalio (de adición)
5.	SiH ₃ NH ₂	silanamina (de sustitución), o amidotrihidrurosilicio (de adición)

6. PH₂Cl clorofosfano 7. PH₂Et etilfosfano TlH₂OOOTlH₂ trioxidanodiilbis(talano) 9. PbEt₄ tetraetilplumbano (de sustitución), o tetraetilplomo (de adición) 10. $GeH(SMe)_3$ tris(metilsulfanil)germano 11. PhGe(Cl)₂(SiCl₃) tricloro[dicloro(fenil)germil]silano;

no es dicloro(fenil)(triclorosilil)germano

12. MePHSiH₃ metil(silil)fosfano;

no es (metilfosfanil)silano ni (sililfosfanil)metano

En los hidruros progenitores polinucleares, se necesitan frecuentemente localizadores numéricos para especificar las posiciones de los grupos sustituyentes. Si hubiera varias numeraciones equivalentes de los átomos del esqueleto del hidruro progenitor respecto de los sustituyentes después de haber aplicado las reglas pertinentes de la Sección IR-6.2, se elige la numeración que conduzca a los localizadores más bajos del compuesto, tomados éstos como un conjunto. Si todavía subsistiera una alternativa de elección, los localizadores más bajos se asignan al sustituyente que se cita al principio del nombre. Si todos los átomos de hidrógeno sustituibles están reemplazados por el mismo sustituyente, pueden omitirse los localizadores, como en el ejemplo 21 siguiente.

Ejemplos:

19.

4,4,4-tribromo- $2\lambda^2$ -tetragermano 13. H₃GeGeGeH₂GeBr₃ (la numeración del progenitor está determinada por el indicador λ) 14. 1 2 3 HCOOSiH₂SiH₂SiH₃ ácido trisilano-1-carboxílico 15. 1 23 HN=NNHMe 3-metiltriaz-1-eno (*no es* 1-metiltriaz-3-eno) (la numeración de los átomos del esqueleto está determinada por la posición de la insaturación) 16. 1 2 3 4 5

ClSiH₂SiHClSiH₂SiH₂SiH₂Cl 1,2,5-tricloropentasilano (no es 1,4,5-)

17. BrSnH₂SnCl₂SnH₂C₃H₇ 1-bromo-2,2-dicloro-3-propiltriestannano (es preferible bromo que propilo para el localizador más bajo)

18. 1 2 3 4 5 HSnCl₂OSnH₂OSnH₂OSnH₂Cl 1,1,7-triclorotetraestannoxano

$$\begin{array}{c} & \underset{\mathsf{N}}{\mathsf{H}} \\ \mathsf{Me}_2\mathsf{Si} & \underset{\mathsf{N}}{\overset{2}{\mathsf{N}}} \\ & \underset{\mathsf{H}}{\mathsf{SiHEt}} \end{array}$$

4-etil-2,2-dimetilciclodisilazano

nombre de H-W: 4-etil-2,2-dimetil-1,3,2,4-diazadisiletano

(es preferible el conjunto localizador 2,2,4 que 2,4,4 en los dos nombres)

20. Et₃PbPbEt₃ 1,1,1,2,2,2-hexaetildiplumbano,

o hexaetildiplumbano (de sustitución),

o bis(trietilplomo)(Pb-Pb) (de adición)

21. MeNHN=NMe 1,3-dimetiltriaz-1-eno

Los nombres de las estructuras ramificadas se basan en la cadena no ramificada más larga posible, la cual se toma como definidora del hidruro progenitor; los nombres de las cadenas más cortas se consideran sustituyentes y se citan adecuadamente. Una vez que se ha seleccionado la cadena más larga, ésta se numera de modo que se obtenga el conjunto de localizadores más bajo para los sustituyentes.

Ejemplos:

22.

2-boraniltriborano(5)

23.

4-disilanil-3-sililheptasilano (*no es* 4-disilanil-5-sililheptasilano)

Si no se pudiera elegir la cadena principal basándose solamente en la longitud de la cadena, el siguiente criterio de selección es la insaturación y después el mayor número de sustituyentes.

Ejemplo:

24.

$$\begin{array}{c|ccccc} CIH_2Si & SiH_2CI \\ & & & \\ HSi & Si & SiH \\ & & & \\ CI_3Si & 3 & SiHCI_2 \end{array}$$

1,1,1,5,5-pentacloro-2,4-bis(clorosilil)pentasilano

(todas las demás cadenas de 5 átomos de silicio tienen menos sustituyentes)

IR-6.3.2 Sustitución de átomos de hidrógeno en los hidruros de boro

Para la construcción de nombres de los derivados de los hidruros de boro en los que se han reemplazado átomos de hidrógeno por grupos sustituyentes se siguen los procedimientos dados en la Sección IR-6.3.1. La única característica especial es la necesidad de especificar el reemplazo de

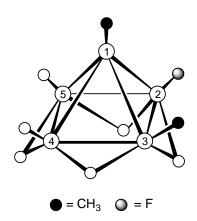
un átomo de hidrógeno puente, en cuyo caso se usa el símbolo 'μ-' delante del nombre del grupo sustituyente, como en el ejemplo 4 que sigue a continuación.

Ejemplos:

1. F₂B B—BF₂

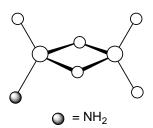
2-(difluoroboranil)-1,1,3,3-tetrafluorotriborano(5)

2.



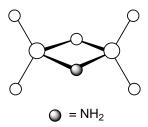
2-fluoro-1,3-dimetilpentaborano(9), o 2-fluoro-1,3-dimetil-2,3:2,5:3,4:4,5-tetra-µ*H-nido*-pentaborano(9)

3.



diboran(6)amina

4.



diboran(6)-µ-amina

IR-6.4 NOMBRES DE LOS IONES Y RADICALES DERIVADOS DE LOS HIDRUROS PROGENITORES

En esta Sección se presentan los nombres de los iones y radicales que pueden derivarse formalmente de hidruros mediante operaciones de eliminación o adición de átomos de hidrógeno, iones hidruro o hidrones. Una gran mayoría de iones y radicales pueden nombrarse también por métodos de adición, como se describe en el Capítulo IR-7. Los nombres de muchos iones y radicales sencillos, nombrados frecuentemente mediante los dos métodos de nomenclatura, se encuentran en la Tabla IX.

IR-6.4.1 Cationes derivados de hidruros progenitores por adición de uno o más hidrones

El nombre de un ion, derivado formalmente de la adición de un hidrón a un hidruro progenitor, se obtiene añadiéndole el sufijo '-io' al nombre del hidruro progenitor con elisión de la 'a' u o' finales. Para nombrar los policationes formados de esta manera se usan los sufijos '-diio', '-triio', etc. sin elisión de la 'a' u o' final del nombre del hidruro progenitor. Los localizadores necesarios se colocan inmediatamente antes del sufijo, de forma que los debidos a hidrones añadidos tienen prioridad sobre los localizadores de insaturación, como en el ejemplo 8 que sigue.

Los nombres alternativos amonio, hidrazinio, hidrazinadiio y oxonio se usan para nombrar derivados orgánicos; véanse la Sección IR-6.4.3 y la Sección P-73.1 de la referencia 1.

Ejemplos:

1.	$\mathrm{NH_4}^+$	azanio, o amonio
2.	$N_2{H_5}^+$	diazanio, o hidrazinio
3.	$N_2 H_6^{\ 2+}$	diazanodiio, o hidrazinadiio
4.	H_3O^+	oxidanio, u oxonio (no es hidronio)
5.	H_4O^{2+}	oxidanodiio
6.	$\mathrm{H_3O_2}^+$	dioxidanio
7.	$H_3PPHPH_3^+$	trifosfano-1,3-diio
8.	$^{+}$ H ₃ N-N=NH	triaz-2-en-1-io

IR-6.4.2 Cationes derivados de hidruros progenitores por pérdida de uno o más iones hidruro

Un catión que se forma a partir de un hidruro progenitor por la pérdida formal de un ion hidruro, se nombra añadiéndole el sufijo '-ilio' al nombre progenitor con elisión de la 'o' o la vocal final. Los policationes que se forman de esta manera se nombran añadiendo los sufijos '-diilio', '-triilio', etc. al nombre del hidruro progenitor sin elisión de la 'o' final. Los localizadores necesarios se colocan precediendo inmediatamente al sufijo, de modo que los que se refieren a los iones hidruro eliminados tienen precedencia sobre los localizadores de insaturación, como en el ejemplo 5.

El sufijo '-ilio' sustituye a la desinencia '-ano' del hidruro progenitor en los nombres silano, germano, estannano y plumbano, así como en algunos hidrocarburos. (Véase la Sección P-73.2 de la referencia 1).

1.	PH^{2+}	fosfanilio
2.	$Si_2H_5^+$	disilanilio
3.	SiH_3^+	sililio
4.	$\mathrm{BH_2}^+$	boranilio

5. ⁺HNN=NH triaz-2-en-1-ilio

IR-6.4.3 **Cationes sustituidos**

Los nombres de los derivados sustituidos de los cationes se forman a partir del nombre del hidruro progenitor modificado –que se describió en IR-6.4.1 e IR-6.4.2 – añadiéndole los prefijos propios de los sustituyentes. Al numerar los derivados de los progenitores polinucleares, los localizadores de los hidrones añadidos o de los iones hidruro eliminados tienen prioridad sobre los localizadores de los sustituyentes, como en el ejemplo 6 siguiente.

Ejemplos:

1. $[NF_4]^+$ tetrafluoroazanio, o tetrafluoroamonio

2. [PCl₄]⁺ tetraclorofosfanio

3. $[NMe_4]^+$ tetrametilazanio, o tetrametilamonio

4. [SEtMePh]⁺ etil(metil)fenilsulfanio

5. [MeOH₂]⁺ metiloxidanio, o metiloxonio

6. [ClPHPH₃]⁺ 2-clorodifosfan-1-io

IR-6.4.4 Aniones derivados de los hidruros progenitores por pérdida de uno o más hidrones

Un anión obtenido formalmente por eliminación de uno o más hidrones a partir de un hidruro progenitor se nombra añadiéndole '-uro', '-diuro', etc. al nombre del progenitor, elidiendo la 'o' o la vocal terminal solamente cuando ésta va antes de '-uro'. Cualquier localizador necesario se coloca precediendo inmediatamente al sufijo. Los localizadores de los hidrones eliminados tienen precedencia sobre los localizadores de insaturación, como en el ejemplo 10.

Ejemplos:

azanuro, o amido[#] 1. NH₂

2. NH²⁻ azanodiuro, o imido#

3. H₂NNH⁻ diazanuro, o hidrazinuro

4. H_2NN^{2-} diazano-1,1-diuro, o hidrazina-1,1-diuro

5. HNNH diazano-1,2-diuro, o hidrazina-1,2-diuro

6. SiH₃ silanuro

7. $GeH_3^$ germanuro

8. SnH_3 estannanuro

9. SH⁻ sulfanuro

^{*} NT. La traducción de los términos ingleses 'amide' e 'imide' debería ser 'amuro' e 'imuro' en español si se cambia la desinencia característica de los aniones '-ide' por '-uro'. Para ellos, se han utilizado los términos españoles 'amiduro' e 'imiduro' en obras de nomenclatura anteriores a ésta en español que, químicamente, suenan como un híbrido extraño. De igual modo que los términos ingleses 'oxide' e 'hydroxide' se corresponden con 'óxido' e 'hidróxido', a 'amide' e 'imide' les corresponden 'amido' e 'imido', tal como aparecen en los ejemplos 1 y 2. Las traducciones de 'oxide' e 'hydroxide' en concordancia con las del primer párrafo 'serían: 'oxuro' e 'hidroxuro', o bien, 'oxiduro' e 'hidroxiduro', que carecen de sentido químico y etimológico.

10. HNN=NH triaz-2-en-1-uro

Los nombres de los aniones derivados por la pérdida formal de uno o más hidrones de los grupos hidroxilo y de sus análogos de los calcógenos –caracterizados por sufijos como '-ol' y '-tiol' – se forman añadiendo la desinencia '-ato' al nombre correspondiente

Ejemplos:

11. SiH₃O⁻ silanolato
12. PH₂S⁻ fosfanotiolato

El anión del ejemplo 12 puede nombrarse también como un derivado del ácido fosfinotioso, H₂PSH, que da lugar al nombre 'fosfinotioito'. Este tipo de nombre se usa como la base para nombrar los derivados orgánicos de H₂PSH. (Véase la discusión sobre ácidos inorgánicos en el Capítulo IR-8).

IR-6.4.5 Aniones derivados de los hidruros progenitores por adición de uno o más iones hidruro

La adición de un ion hidruro a un hidruro progenitor se indica por la desinencia '-uuro' (véase la Sección P-73.2 de la referencia 1). Las reglas referidas a los localizadores son análogas a las dadas para el sufijo '-uro' (véase la Sección IR-6.4.4). Los nombres de adición (Capítulo IR-7) son alternativas habituales y aceptables para los compuestos de este tipo.

Ejemplo:

1. [BH₄] boranuro (de borano), o tetrahidruroborato(-1) (de adición)

IR-6.4.6 **Aniones sustituidos**

Los nombres de los derivados sustituidos de los aniones se forman a partir de los nombres de los hidruros progenitores, modificados como ya se ha indicado anteriormente (véanse las Secciones IR-6.4.4 e IR-6.4.5), añadiéndoles los prefijos adecuados de los sustituyentes. Al numerar la estructura, la posición de la que se eliminó un hidrón o se añadió un ion hidruro tiene precedencia sobre las posiciones con sustituyentes, como en el ejemplo 4 siguiente. En muchos casos, los nombres de adición son alternativas aceptables y habituales.

1.	SnCl ₃	tricloroestannanuro (de estannano), o tricloruroestannato(1–) (de adición)
2.	CH₃PH⁻	(o Me PH ⁻) metilfosfanuro
3.	CH ₃ NH [−]	(o Me PH ⁻) metilazanuro, o metilamido, o metanaminuro (todos ellos de sustitución, véase la Sección P-72.2 de la referencia 1)
4.	1 23 45 67 89	
	$^-$ SnH ₂ OSnH ₂ OSnH ₂ OSnH ₂ OSnCl ₃	9,9,9-tricloropentaestannoxan-1-uro
5.	[BH ₃ CN] ⁻	cianoboranuuro (de borano), o cianurotrihidruroborato(1–) (de adición)
6.	$[PF_6]^-$	hexafluoro- λ^5 -fosfanuuro (de fosfano),

IR-6.4.7 Radicales y grupos sustituyentes

Los radicales y los grupos sustituyentes que se derivan por la eliminación de uno o más átomos de hidrógeno de hidruros progenitores se nombran modificando el nombre del hidruro progenitor como sigue:

- (i) si se elimina un átomo de hidrógeno: se le añade el sufijo '-il(o)' (elidiendo la 'o' final del nombre del hidruro progenitor);
- (ii) si se eliminan dos o más átomos de hidrógeno: se le añade el sufijo '-il(o)' con el prefijo multiplicador conveniente (sin elidir la vocal).

El sufijo '-*ilideno*' se usa para un grupo sustituyente si está implicado en un enlace doble cuando un átomo del esqueleto ha perdido formalmente dos átomos de hidrógeno. Si está implicado un enlace triple, se usa la terminación '-*ilidino*'. Con estas desinencias se elide, de nuevo, la 'o' final del nombre del hidruro progenitor.

En los radicales se usa el sufijo 'ilideno' si se eliminan los dos hidrógenos del mismo átomo.

A veces, es necesario el uso de localizadores para indicar los átomos del esqueleto de los que se han eliminado los átomos de hidrógeno. Dichos localizadores se colocan inmediatamente antes del sufijo. Al numerar la estructura, las posiciones de las que se han eliminado los átomos de hidrógeno tienen precedencia sobre las insaturaciones, como en el ejemplo 9 siguiente.

Los radicales también se pueden nombrar por medio de la nomenclatura de adición; véase la Sección IR-7.1.4 y los ejemplos en las secciones posteriores del Capítulo IR-7.

Ejemplos:

1.	NH ² •	azanilideno
2.	PH_2^{\bullet} y H_2P-	fosfanil(o)
3.	PH ² y HP=	fosfanilideno
4.	HP<	fosfanodiil(o)
5.	P≡	fosfanilidino
6.	$H_2Br^{\bullet}y H_2Br-$	λ^3 -bromanil(o)
7.	$H_2NNH^{\bullet}y H_2NHN^{-}$	diazanil(o) o hidrazinil(o)
8.	•NHNH• y –NHNH–	diazano-1,2-diil(o) o hidrazina-1,2-diil(o)
9.	HP=NP [•] NHPH [•] y HP=NPNHPH-	trifosfaz-4-eno-1,3-diil(o)

En varios casos, el nombre habitual de un grupo o radical sustituyente no es un nombre sistemático o es una versión más corta, que se obtiene al reemplazar la desinencia '-ano' del nombre progenitor por los sufijos '-il(o)' o '-ilideno'.

10. OH [•]	hidroxil(o) (para oxidanil(o))
11. OH-	hidroxi (para oxidanil)
12. NH ₂ •	aminil(o) (para azanil(o))

```
13. NH_2- amino (para azanil)

14. CH_2^{2\bullet} metilideno (para metanilideno), o \lambda^2-metano, o carbeno

15. SiH_3^{\bullet} y SiH_3- silil(o) (para silanil(o))

16. GeH_3^{\bullet} y GeH_3- germil(o) (para germanil(o))

17. SnH_3^{\bullet} y SnH_3- estannil(o) (para estannanil(o))

18. PbH_3^{\bullet} y PbH_3- plumbil(o) (para plumbanil(o))
```

Esta lista es completa para todos los hidruros progenitores sin carbono. Para los hidruros basados en el carbono se utilizan también numerosos nombres abreviados o completamente no-sistemáticos tradicionales: metil, etil, propil, butil, pentil, hexil, ciclohexil, fenil, naftil, etc.

IR-6.4.8 Radicales sustituidos o grupos sustituyentes

Los radicales o grupos sustituyentes que se derivan formalmente de la eliminación de uno o más átomos de hidrógeno y la introducción de sustituyentes en los hidruros progenitores se nombran utilizando prefijos para los sustituyentes como se explicó en la Sección IR-6.3.1. Las posiciones de las que se eliminaron los átomos de hidrógeno tienen prioridad sobre las posiciones con sustituyentes. En la Tabla IX se encuentran los nombres de varios de dichos radicales y grupos sustituyentes sencillos. En algunos casos, pueden diferir el nombre de un radical y el del correspondiente grupo sustituyente tal como se usa en química orgánica (véase el ejemplo 2 siguiente).

Ejemplos:

IR-6.4.9 Centros aniónicos y catiónicos y radicales en una molécula o ion

Si en una molécula o ion se encuentran varias de las características anteriores —un fragmento catiónico o aniónico, o un radical formado por la eliminación de átomos de hidrógeno— se requiere una regla para decidir el orden en que se citan las diferentes modificaciones del nombre del hidruro progenitor.

El orden es el siguiente:

catión < anión < radical

entendiéndose que:

- (i) los sufijos que indican estas modificaciones se citan precisamente en dicho orden,
- (iii) los localizadores más bajos se asignan a las posiciones de las que se han eliminado los átomos de hidrógeno, si las hubiera; las posiciones aniónicas, si las hubiera, se numeran utilizando los siguientes localizadores mas bajos; finalmente, se numeran los sitios catiónicos. Todos ellos

tienen precedencia sobre las insaturaciones y sobre los sustituyentes citados como prefijos.

Ejemplos:

1.
$$H_2 Te^{\bullet +}$$
 telanioil(o)

2.
$$H_2 Te^{\bullet -}$$
 telanuidil(o)

3. 2 1
$$Me_3N^+ - N^- - Me \qquad \qquad 1,2,2,2\text{-tetrametildiazan-2-io-1-uro}$$

4. 3 2 1
$$MeN=N^{\bullet+}-N^{-}-SiMe_3$$
 3-metil-1-(trimetilsilil)triaz-2-en-2-io-1-ur-2-il(o)

Si se desea nombrar un grupo sustituyente que contiene un centro radicalario surgen complicaciones adicionales (véase la Sección P-71.5 de la referencia 1).

IR-6.5 REFERENCIAS

- 1. *Nomenclature of Organic Chemistry, IUPAC Recommendations*, W. H. Powell y H. Favre (Eds.), Royal Society of Chemistry, en preparación.
- 2. K. Wade, *Adv. Inorg. Chem. Radiochem.*, **18**, 1–66 (1976); R. E. Williams, *Adv. Inorg. Chem. Radiochem.*, **18**, 67–142 (1976); D. M. P. Mingos, *Acc. Chem. Res.*, **17**, 311-319 (1984).
- 3. R. W. Rudolph y W. R. Pretzer, *Inorg. Chem.*, **11**, 1974–1978 (1972); R. W. Rudolph, *Acc. Chem. Res.*, **9**, 446–452 (1976).

IR-7 Nomenclatura de adición

CONTENIDO

TD 7	7 1	т ,	1		٠	/
IR-7	/ I	Intro	α	1100	1 /	$^{\circ}$
11/-	/ . I	muo	u	ucc	ľ	ווע

- IR-7.1.1 Generalidades
- IR-7.1.2 La elección de un átomo o átomos centrales o de una estructura en cadena o cíclica
- IR-7.1.3 La denominación de los ligandos en los nombres de adición
- IR-7.1.4 Iones y radicales
- IR-7.2 Entidades mononucleares
- IR-7.3 Entidades polinucleares
 - IR-7.3.1 Entidades dinucleares simétricas
 - IR-7.3.2 Compuestos dinucleares no-simétricos
 - IR-7.3.3 Compuestos oligonucleares
- IR-7.4 Cadenas y ciclos inorgánicos
 - IR-7.4.1 Generalidades
 - IR-7.4.2 El descriptor nodal
 - IR-7.4.3 Construcción de los nombres
- IR-7.5 Referencias

IR-7.1 INTRODUCCIÓN

IR-7.1.1 **Generalidades**

La nomenclatura de adición fue desarrollada originalmente para los compuestos de coordinación de tipo Werner, que se consideraban constituidos por un átomo (o átomos) central(es) rodeado(s) por grupos añadidos conocidos como ligandos, aunque puede servir para asignar con propiedad nombres de adición a muchos otros tipos de compuestos. Dichos nombres se construyen colocando los nombres de los ligandos (modificados en ocasiones) como prefijos del nombre (o nombres) del (de los) átomo(s) central(es).

En este capítulo se tratan las características generales de la nomenclatura de adición y se proporcionan ejemplos de nombres de adición de compuestos mononucleares y polinucleares sencillos. A continuación, se tratan los compuestos en cadena y cíclicos usando los principios de la nomenclatura de adición complementados con convenios adicionales. Los nombres de adición de los ácidos inorgánicos se discuten en el Capítulo IR-8. La nomenclatura de adición, tal como se aplica a los compuestos de coordinación de los metales, se describe con mayor detalle en el Capítulo IR-9 (donde un diagrama de flujo, Figura IR-9.1, proporciona un procedimiento general para nombrar los compuestos de coordinación). En la Tabla IX* se encuentran los nombres de adición de un elevado número de compuestos sencillos.

En algunos casos, puede observarse que los compuestos que se nombran por adición pueden nombrarse alternativamente y de forma igualmente sistemática tomando como base una estructura

⁻

^{*} Las Tablas numeradas con números romanos se encuentran juntas al final de este libro

progenitora elegida correctamente (Capítulo IR-6). No obstante, es importante recordar que los nombres de adición de los hidruros progenitores no se pueden usar como nombres progenitores en la nomenclatura de sustitución.

IR-7.1.2 La elección de un átomo o átomos centrales o de una estructura en cadena o cíclica

La elección del átomo o átomos centrales es un paso clave en el proceso de nombrar un compuesto mediante la nomenclatura de adición. Si hay un átomo o átomos metálicos en el compuesto, éstos se deben elegir como átomo o átomos centrales. Dichos átomos deben ser también relativamente centrales en la estructura y, donde sea posible, deben seleccionarse para usar la simetría molecular y, de este modo, simplificar el nombre.

En algunos compuestos puede haber distintas opciones para elegir el átomo central. En el caso de que exista una alternativa entre diferentes átomos, para seleccionar a uno de ellos como átomo central, debe elegirse como tal a aquél que se encuentra el último al seguir las flechas de la Tabla VI.

Si existe más de un átomo central en una estructura, según el criterio anterior, entonces el compuesto debe nombrarse como dinuclear o polinuclear.

Una alternativa al procedimiento anterior consiste en elegir un grupo de átomos que forme una subestructura de cadena o ciclo dentro del compuesto con el fin de darle un nombre de adición usando la nomenclatura de cadenas y ciclos resumida en la Sección IR-7.4.

IR-7.1.3 La denominación de los ligandos en los nombres de adición

Los nombres de adición se construyen colocando los nombres de los ligandos (modificados en algunas ocasiones) como prefijos del nombre del átomo central. Las desinencias '-uro', '-ato' e '-ito' de ligandos aniónicos (véase la Sección IR-5.3.3) no cambian al generar estos prefijos. Los nombres de los ligandos neutros y catiónicos también se usan sin modificaciones excepto en unos pocos casos especiales, en particular el agua (cuyo prefijo es 'acuo'), el amoniaco (cuyos prefijo es 'ammino', monóxido de carbono (prefijo 'carbonilo') y monóxido de nitrógeno unido por el nitrógeno (prefijo 'nitrosilo') (Sección IR-9.2.4.1).

En principio, es una cuestión de convenio si se considera que un ligando es aniónico, neutro o catiónico. El defecto consiste en considerar que los ligandos son siempre aniónicos, de forma que OH es 'hidroxido', Cl 'cloruro', SO₄ 'sulfato, etc. Algunos ligandos se consideran, convencionalmente, que son neutros (v.g., las aminas, los fosfanos y los ligandos derivados de los hidrocarburos por eliminación de un átomo de hidrógeno, como metil, bencil, etc.).

Los prefijos pertinentes para designar muchos ligandos sencillos en los nombres se encuentran en la Tabla IX. Para casos más detallados, véase la Sección IR-9.2.2.3.

IR-7.1.4 **Iones y radicales**

Las especies aniónicas toman la desinencia '-ato' en la nomenclatura de adición, mientras que no se usa ninguna terminación en particular para las especies neutras o catiónicas. Los nombres de adición de los iones finalizan con el número de carga (véase la Sección IR-5.4.2.2). En el caso de los nombres de adición de los radicales, el carácter radicalario del compuesto puede indicarse por medio de un punto de radical, •, añadido entre paréntesis y centrado en la línea después del nombre del compuesto. Los poli-radicales se indican por medio del número apropiado colocado antes del punto. Por ejemplo, un di-radical se indica con '(2•)'.

IR-7.2 ENTIDADES MONONUCLEARES

Los nombres de los compuestos e iones mononucleares, es decir, de las especies que poseen un único átomo central se forman citando los prefijos pertinentes de los ligandos, en orden alfabético, delante del nombre del átomo central. Cuando hay varios ligandos iguales, se reúnen en el nombre mediante prefijos multiplicadores (Tabla IV), es decir, 'di', 'tri', 'tetra', etc. en el caso de que sean ligandos sencillos como cloruro, bencilo, acuo, ammino o hidróxido y 'bis', 'tris', 'tetrakis', etc. cuando se trata de ligandos más complicados como 2,3,4,5,6-pentaclorobencilo o trifenilfosfano. Los últimos prefijos se usan también para evitar cualquier ambigüedad que podría producir el uso de 'di', 'tri', etc. Los prefijos multiplicadores que no son parte inherente del nombre del ligando no afectan al orden alfabético.

Los prefijos que designan a los ligandos pueden separarse por signos de inclusión (véase la Sección IR-9.2.2.3) y esto debe de hacerse con todos los ligandos, incluyendo los ligandos orgánicos, excepto con los más sencillos. En algunos casos, el uso de los signos de inclusión es esencial para evitar ambigüedades, como se puede observar en los ejemplos 10 y 11 siguientes. En varios de estos ejemplos se dan también los nombres de sustitución (véase el Capítulo IR-6). Sin embargo, en algunos casos no se dispone del hidruro progenitor para la construcción del nombre de sustitución (ejemplos 9 y 11). Obsérvese también que las fórmulas que se dan más adelante entre corchetes son fórmulas del tipo compuesto de coordinación, en las que el átomo central se coloca en primer lugar.

105.		
1.	Si(OH) ₄	tetrahidroxidosilicio (de adición), o silanotetrol (de sustitución)
2.	B(OMe) ₃	trimetoxidoboro, o tris(metanolato)boro (ambos de adición), o trimetoxiborano (de sustitución)
3.	FClO o [ClFO]	fluorurooxidocloro (de adición), o fluoro-λ ³ -cloranona (de sustitución)
4.	ClOCl o [OCl ₂]	diclorurooxígeno (de adición), o diclorooxidano (de sustitución)
5.	$[Ga{OS(O)Me}_3]$	tris(metanosulfinato)galio (de adición), tris(metanosulfiniloxi)galano (de sustitución)
6.	$MeP(H)SiH_3 o$ $[SiH_3{P(H)Me}]$	trihidruro(metilfosfanuro)silicio (de adición), o metil(silil)fosfano (de sustitución)
7.	NH ^{2•}	hidruronitrogeno(2•) (de adición), o azanilideno (de sustitución)
8.	HOC(O)•	hidroxidooxidocarbono(•) (de adición), o hidroxioxometil (de sustitución)
9.	FArH o [ArFH]	fluorurohidruroargón
10.	[HgMePh]	metil(fenil)mercurio (de adición)
11.	[Hg(CHCl ₂)Ph]	(diclorometil)(fenil)mercurio

12. $[Te(C_5H_9)Me(NCO)_2]$

bis(cianato-N)(ciclopentil)(metil)teluro (de adición), o ciclopentildiisocianato(metil)- λ^4 -telano (de sustitución)

13. $[Al(POCl_3)_6]^{3+}$	hexakis(triclorurooxidofosforo)aluminio(3+)
14. $[Al(OH_2)_6]^{3+}$	hexaacuoaluminio(3+)
15. $[H(py)_2]^+$	bis(piridina)hidrógeno(1+)
16. $[H(OH_2)_2]^+$	diacuohidrógeno(1+)
17. $[BH_2(py)_2]^+$	dihidrurobis(piridina)boro(1+)
18. $[PFO_3]^{2-}$	fluorurotrioxidofosfato(2-)
19. [Sb(OH) ₆] ⁻	hexahidroxidoantimonato(1–) (de adición), o hexahidroxi-λ ⁵ -estibanuuro (de sustitución)
20. [HF ₂] ⁻	difluorurohidrogenato(1-)
21. [BH ₂ Cl ₂] ⁻	diclorurodihidruroborato(1–) (de adición), o dicloroboranuuro (de sustitución)
22. OCO•-	dioxidocarbonato(ullet-)
23. NO ^{(2•)-}	oxidonitrato(2•1−)
24. PO ₃ •2-	trioxidofosfato(•2–)
25. [ICl ₂] ⁺	dicloruroyodo(1+) (de adición), o dicloroyodanio (de sustitución)
26. [BH ₄] ⁻	tetrahidruroborato(1–) (de adición), o boranuuro (de sustitución)
27. CH ₅	pentahidrurocarbonato(1–) (de adición), o metanuuro (de sustitución)
28. [PH ₆] ⁻	hexahidrurofosfato(1–) (de adición), o λ^5 -fosfanuuro (de sustitución)
29. [PF ₆]	hexafluorurofosfato(1–) (de adición), o hexafluoro-λ ⁵ -fosfanuuro (de sustitución)

IR-7.3 ENTIDADES POLINUCLEARES

IR-7.3.1 Entidades dinucleares simétricas

En las unidades dinucleares simétricas, los dos átomos centrales son del mismo elemento y están ligados de forma idéntica. Los nombres de adición en distintos formatos de varias de éstas especies

se ofrecen más adelante. En algunos casos, los nombres de sustitución se construyen también fácilmente, como se verá en los párrafos siguientes.

El procedimiento general para nombrar una entidad dinuclear simétrica es el siguiente: Los ligandos se representan de la manera habitual y el afijo multiplicador 'di' se añade inmediatamente antes del nombre del átomo central. Si el compuesto es un anión, el nombre del elemento central se modifica con la desinencia '-ato'.

La existencia de un enlace entre los dos átomos centrales se indica añadiéndole al nombre los símbolos de los dos átomos en letra cursiva unidos por un guión extralargo y encerrados entre paréntesis.

Los ligandos puente en especies dinucleares se indican con la letra griega μ colocada antes del nombre del ligando y unida a él con un guión. El término completo, v.g., ' μ -cloruro', se separa del resto del nombre con guiones. Si hay más de un ligando puente idéntico, se emplean prefijos multiplicadores (véanse también las Secciones IR-9.1.2.10 e IR-9.3.5.2).

Ejemplos:

1.	[Et ₃ PbPbEt ₃]	hexaetildiplomo (<i>Pb—Pb</i>) (de adición), o hexaetildiplumbano (de sustitución)
2.	HSSH•⁻	dihidrurodisulfato(S — S)(\bullet 1 $-$) (de adición), o disulfanuidilo (de sustitución)
3.	NCCN	dinitrurodicarbono(C—C)
4.	NCCN ^{•-}	dinitrurodicarbonato(C — C)(\bullet 1 $-$)
5.	(NC)SS(CN)	bis(nitrurocarbonato)diazufre(<i>S</i> — <i>S</i>), o dicianurodiazufre(<i>S</i> — <i>S</i>)
6.	(NC)SS(CN) ^{•–}	bis(nitrurocarbonato)disulfato(S — S)(\bullet 1 $-$), o dicianurodisulfato
7.	OCIO	μ-cloruro-dioxígeno, o dioxidocloro
8.		CI CI CI CI

di-u-cloruro-tetraclorurodialuminio

 $Al_2Cl_4(\mu-Cl)_2$

Una variante del formato de los nombres de adición anteriores consiste en construirlos comenzando por 'bis' y después citar el nombre de la mitad de la molécula entre paréntesis. De este modo, los ejemplos 1–6 y 8 se convierten en los siguientes:

9.	$[Et_3PbPbEt_3]$	bis(trietilplomo)
10.	HSSH•-	bis(hidrurosulfato)(S — S)(\bullet 1 $-$)
11.	NCCN	bis(nitrurocarbono)(<i>C</i> — <i>C</i>)

12. NCCN [•]	bis(nitrurocarbonato)(C — C)(\bullet 1 $-$)
13. (NC)SS(CN)	bis[(nitrurocarbonato)azufre](<i>S</i> — <i>S</i>), o bis(cianuroazufre)(<i>S</i> — <i>S</i>)
14. (NC)SS(CN)•-	bis[(nitrurocarbonato)sulfato](S — S)(\bullet 1 $-$), o bis(cianurosulfato) (S — S)(\bullet 1 $-$)
15. $Cl_2Al(\mu-Cl)_2AlCl_2$	di-µ-cloruro-bis(dicloruroaluminio)

Obsérvese que los cinco compuestos de los ejemplos 10–14 pueden nombrarse también con facilidad como compuestos en cadena, como se muestra en la Sección IR-7.4. El nombre del ejemplo 14 difiere del que se dio en la referencia 1 (en la que se indica de igual manera el enlace azufre-azufre como pero los átomos de carbono se trataron como los átomos centrales).

También se pueden considerar que las especies de los ejemplos 13 y 14 contienen un ligando puente, como se muestra en los ejemplos 16 y 17.

Ejemplos:

16. [NCSSCN] μ-disulfanodiuro-bis(nitrurocarbono)
 17. [NCSSCN] μ-disulfanodiuro-bis(nitrurocarbonato)(•1-)

IR-7.3.2 Compuestos dinucleares no-simétricos

Existen dos tipos de compuestos dinucleares no-simétricos: (i) con los átomos centrales idénticos, pero enlazados de diferente manera, e (ii) con los átomos centrales diferentes. En ambos casos, los nombres se forman mediante el procedimiento descrito en la Sección IR-9.2.5, que trata también de los grupos puente.

La prioridad se asigna a los átomos centrales como sigue. En los casos del tipo (i), se numera con 1 al átomo central que lleva el mayor número de ligandos preferidos alfabéticamente. En los casos del tipo (ii), se asigna el número 1 al elemento central de mayor prioridad según la Tabla VI, independientemente de la distribución de los ligandos.

Para ambos tipos de compuestos, los nombres se construyen de la manera habitual citando primero los prefijos que representan a los ligandos en orden alfabético. A cada prefijo que representa a un ligando le sigue un guión, el (o los) número(s) que se asigna(n) al (o a los) átomo(s) central(es) al (a los) que está unido (véase más adelante), la letra griega κ (kappa) (véase la Sección IR-9.2.4.2) con un superíndice que indica el número de dichos ligandos unidos al átomo central omitiendo el número 1 para un solo ligando, y el símbolo del elemento, en cursiva, del átomo ligante con el que el ligando se une al (o a los) átomo(s) central(es). De esta manera, se describen los ligandos y su modo de unión. La construcción κ puede omitirse en los casos muy sencillos (véanse los ejemplos 1–3) o cuando la distribución de los ligandos en los átomos centrales es obvia (véase el ejemplo 4).

Los nombres de los átomos centrales se citan después de los nombres de los ligandos. Se usa el prefijo multiplicador 'di' cuando los átomos centrales son del mismo elemento; en caso contrario, el orden de los nombres de los átomos centrales se obtiene mediante la Tabla VI. El orden de los nombres de los átomos centrales se refleja en la numeración empleada con los símbolos κ. Si el compuesto dinuclear es un anión se añade la desinencia '-ato' y puede añadirse un punto de radical para los radicales. En el caso de que los átomos centrales sean diferentes, los dos nombres se citan dentro de un paréntesis y la terminación '-ato' queda fuera del mismo.

Ejemplos:

1. ClClO oxido-
$$1\kappa O$$
-dicloro(Cl — Cl), u oxidodicloro(Cl — Cl)

2. ClOO• cloruro-1
$$\kappa$$
Cl-dioxígeno(O—O)(•), o clorurodioxígeno(O—O)(•)

3.
$$ClClF^+$$
 fluoruro- $1\kappa Cl$ -dicloro(Cl - Cl)(1+), o fluorurodicloro(Cl - Cl)(1+)

4.
$$[O_3POSO_3]^{2-}$$
 μ -oxido-hexaoxido- $1\kappa^3O$, $2\kappa^3O$ -(fosforoazufre)ato(2–), o μ -oxido-hexaoxido(fosforoazufre)ato(2–)

etil- $2\kappa C$ -tetrametil- $1\kappa^3 C$, $2\kappa C$ - μ -tiofeno-2,5-diil-estañobismuto

6. 2 1 [Cl(PhNH)₂GeGeCl₃] tetracloruro-
$$1\kappa^3 C$$
, $2\kappa Cl$ -bis(fenilamido- $2\kappa N$)-digermanio(Ge — Ge)

7. 1 2 LiPbPh₃ trifenil-
$$2\kappa^3 C$$
-litioplomo(Li — Pb)

El convenio kappa no se puede usar si no se conocen las características de la unión con precisión.

Ejemplos:

8. [Pb₂(CH₂Ph)₂F₄] dibenciltetrafluorurodiplomo

9. [Ge₂(CH₂Ph)Cl₃(NHPh)₂] (bencil)triclorurobis(fenilamido)digermanio

IR-7.3.3 Compuestos oligonucleares

Los principios de las secciones precedentes se pueden generalizar en casos sencillos para la nomenclatura de compuestos oligonucleares. De nuevo, existen compuestos que se pueden nombrar también con facilidad mediante la nomenclatura de sustitución debido a la disponibilidad de hidruros progenitores obvios.

1.	HO_3^{\bullet}	hidrurotrioxígeno(●)
2.	$HON_3^{\bullet-}$	hidroxido- $1\kappa O$ -trinitrato($2 N$ — N)($\bullet 1$ —)
3.	Cl ₃ SiSiCl ₂ SiCl ₃	octaclorurotrisilicio(2 <i>Si</i> — <i>Si</i>) (de adición), u octaclorotrisilano(de sustitución)
4.	FMe ₂ SiSiMe ₂ Me ₃	flururo-1κ <i>F</i> -heptametiltrisilicio(2 <i>Si</i> — <i>Si</i>) (de adición), o 1-fluoro-1,1,2,2,3,3,3-heptametiltrisilano (de sustitución)

(Se puede generar también un nombre alternativo del compuesto del ejemplo 3, basado en la cadena más larga de la molécula, por el método descrito en la Sección IR-7.4.3; véase el ejemplo 6 en esa Sección).

En sistemas heterooligonucleares, se requieren convenios adicionales para identificar y nombrar la colección de átomos centrales, numerarlos y proporcionar localizadores para los ligandos.

Ejemplo:

5. Me₃SiSeSiMe₃

μ-selenuro-bis(trimetilsilicio) (de adición), o hexametil- $1\kappa^3 C$, $2\kappa^3 C$ -disilicioselenio(2 Si—Se) (de adición), o 1,1,1,3,3,3-hexametildisilaselenano (de sustitución)

Obsérvese que en este último ejemplo se puede nombrar el compuesto como dinuclear o trinuclear. La dificultad que se deriva de las variaciones estructurales que pueden surgir en clústeres homonucleares y heteronucleares debidas a los átomos centrales y los grupos puente se tratan con mayor detalle en las Secciones IR-9.2.5.6–IR-9.2.5.8.

IR-7.4 CADENAS Y CICLOS INORGÁNICOS

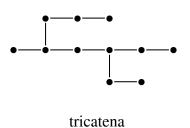
IR-7.4.1 Generalidades

Las estructuras en cadena y cíclicas pueden nombrarse independientemente de la naturaleza de los enlaces, excepto la conectividad de la molécula o ion, mediante un sistema particular de la nomenclatura de adición. El método se puede aplicar a todos los compuestos en cadena y cíclicos aunque está diseñado para especies constituidas por átomos distintos del carbono. Mientras que las moléculas pequeñas se pueden nombrar más fácilmente usando varios métodos alternativos, la ventaja de este sistema de nomenclatura radica en la simplicidad con que se pueden inferir estructuras complicadas a partir del nombre y viceversa. Los detalles de este sistema se encuentran en la referencia 2, mientras que aquí se describe un tratamiento simplificado.

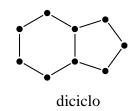
La topología de la estructura se especifica como sigue. Un compuesto neutro con estructura en cadena se nombra con el término 'catena' precedido por el prefijo multiplicador 'di', 'tri', etc. para indicar el número de ramas de la molécula. De igual manera, los compuestos cíclicos se nombran con el término 'ciclo' precedido del prefijo multiplicador apropiado. Un compuesto mixto con cadenas y ciclos se clasifica como una *construcción* compuesta de *módulos* cíclicos y acíclicos. Si es neutro, se nombra con el término 'catenaciclo' precedido por los prefijos multiplicadores pertinentes insertados como se indica en el ejemplo 3 siguiente.

Ejemplos:

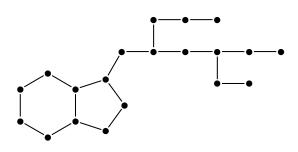
1.



2.



3.



tricatenadiciclo

IR-7.4.2 El descriptor nodal

La conectividad en el armazón molecular se indica por medio de un *descriptor nodal*, que se coloca entre corchetes inmediatamente antes de los términos 'catena', 'ciclo' o 'catenaciclo'. Los átomos se numeran según la nomenclatura nodal general, independientemente de su identidad. Solamente en el caso de que surjan ambigüedades se tienen en consideración las identidades de los átomos.

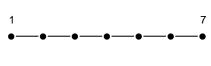
La primera parte del descriptor indica el número de átomos en la cadena principal. Los números arábigos que siguen al punto final indican las longitudes de las ramas, citadas por orden de prioridad. Un localizador, en formato de superíndice para cada ramificación, denota al átomo de la parte de la molécula que ya está numerada al que está unida la ramificación.

Un cero en el descriptor indica un ciclo y le sigue un número arábigo que indica el número de átomos en el anillo principal. En sistemas policíclicos la numeración comienza desde una de las cabezas de puente y continúa en la dirección que dé los localizadores más bajos para la otra cabeza de puente. En este caso, el número de átomos en el puente se cita después del punto final. Por cada uno de dichos números asignados al puente, se inserta un par de localizadores como superíndices, separados por una coma y citados en orden numérico creciente.

Un descriptor de una construcción consta de corchetes que encierran, en el orden de su precedencia (véase la referencia 2 sobre sus normas), a los descriptores nodales de cada uno de los módulos entre paréntesis. Los localizadores de los nodos que unen a los módulos están indicados entre sus descriptores. Estos localizadores, separados por dos puntos, son los números de los átomos en la numeración *final* de la construcción completa (compárese el ejemplo 7 con los ejemplos 5 y 6 siguientes).

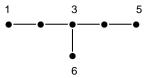
Ejemplos:

1.



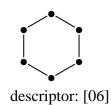
descriptor: [7]

2.

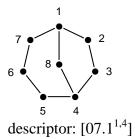


descriptor: [5.1³]

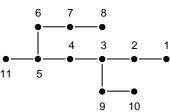
3.



4.

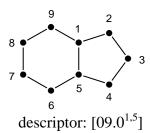


5.

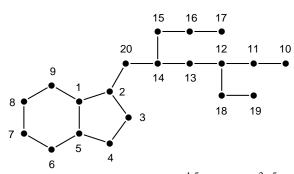


descriptor: [8.2³1⁵]

6.



7.



descriptor: $[(09.0^{1.5})2:20(8.2^31^5)]$

IR-7.4.3 Construcción de los nombres

Los átomos que forman el esqueleto nodal se escriben en orden alfabético, se completan con sus localizadores y se nombran con sus términos en 'i'. Algunos ejemplos se encuentran en la Tabla IR-7.1 y la lista completa se encuentra en la Tabla X.

Tabla IR-7.1 Algunos términos en 'i' para nombrar los elementos en el entramado nodal

hidroni	C	carbi	N	azi	O	oxi
bori	Si	sili	P	fosfi	S	sulfi
	Ge	germi	As	arsi	Se	seleni
	Sn	estanni	Sb	estibi	Te	teluri
		bori Si Ge	bori Si sili Ge germi	bori Si sili P Ge germi As	bori Si sili P fosfi Ge germi As arsi	bori Si sili P fosfi S Ge germi As arsi Se

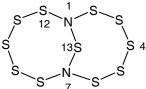
Los átomos y grupos de átomos que no son parte del armazón nodal se nombran como ligandos (Sección IR-7.1.3) y se citan en orden alfabético, junto con sus localizadores, antes de la secuencia de los nombres de los átomos que constituyen el armazón nodal. A continuación, se proporciona el descriptor nodal y el término 'catena', 'ciclo' o 'catenaciclo' se añade al final (Sección IR-7.4.1). Obsérvese que en este sistema no se emplean ligandos puente.

Si se trata de especies aniónicas o catiónicas, estos términos se modifican con las desinencias '-ato' e '-io', respectivamente, que generan los términos 'catenato', 'catenio', 'ciclato', 'ciclio', 'catenadiciclio', 'catenaciclato', etc., a los que se les añade un número de carga al final del nombre. De igual modo, pueden indicarse las especies radicalarias usando el punto de radical (véase la Sección IR-7.1.4)

Los ejemplos 1–6, que muestran el uso del sistema que se describe aquí, se nombraron en la Sección IR-7.3.1. Los ejemplos 7–13 no se pueden nombrar con igual facilidad por otros métodos.

Ejemplos:

1. **NCCN** 1,4-diazi-2,3-dicarbi-[4]catena NCCN* 1,4-diazi-2,3-dicarbi-[4]catenato($\bullet 1$ -) 1,6-diazi-2,5-dicarbi-3,4-disulfi-[6]catena 3. (NC)SS(CN) $(NC)SS(CN)^{\bullet-}$ 1,6-diazi-2,5-dicarbi-3,4-disulfi-[6]catenato(•1-) HSSH* 5. 1,2-dihidruro-1,2-disulfi-[2]catenato(•1–) Cl₃SiSiCl₂SiCl₃ 2,2,3,3,4,4-hexacloruro-1,5-diclori-2,3,4-trisili-[5]catena 7. ClSiH₂SiH(Me)NSO 2,2,3-trihidruro-3-metil-4-azi-1-clori-6-oxi-2,3-disili-[5]catena 8.



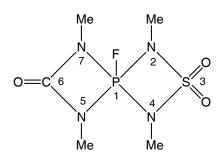
1,7-diaziundecasulfi-[012.1^{1,7}]diciclo

Puesto que este compuesto contiene solamente nitrógeno y azufre, no es necesario indicar los localizadores de todos los átomos de azufre, sino que, solamente se necesitan los localizadores de los dos átomos de nitrógeno. Las mismas ideas se aplican a varios de los ejemplos siguientes.

9.

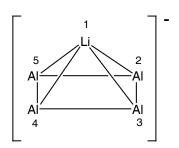
3,6-diyoduro-1,3,4,6-tetrafosfi-2,5,7-trisulfi-[06.1^{1,4}]diciclo

10.



1-fluoruro-2,4,5,7-tetrametil-3,3,6-trioxido-2,4,5,7-tetraazi-6-carbi-1-fosfi-3-sulfi-[04.3^{1,1}]diciclo

11.

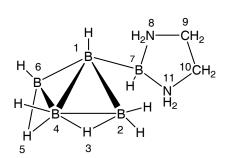


 $tetra alumini-1-liti-[05.0^{1,3}0^{1,4}0^{2,5}] tetraciclato(1-) \\$

12.

1,11-diazihexasulfi-[(08)1:9(2)10:11(08)]catenadiciclo

13.



 $1,2,2,4,6,7,8,8,9,9,10,10,11,11-tetradecahidruro-8.11-diazi-1,2,4,6,7-pentabori-9,10-dicarbi-3,5-dihidroni-[(06.0^{1,4}0^{2,4}0^{4,6})1:7(05)] pentaciclo$

IR-7.5 REFERENCIAS

- 1. Names for Inorganic Radicals, W. H. Koppenol, *Pure Appl. Chem.*, **72**, 437–446 (2000).
- 2. Nomenclature of Inorganic Chains and Ring Compounds, E. O. Fluck y R. S. Laitinen, *Pure Appl. Chem.*, **69**, 1659–1692 (1997); Capítulo II-5 de *Nomenclature of Inorganic Chemistry II, IUPAC Recommendations 2000*, J. A. McCleverty y N. G. Connelly (Eds.), Royal Society of Chemistry, 2001 (El *Libro Rojo II*).